

# Mott-Hubbard Isolator in hoher Dimension



## Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades  
der Naturwissenschaften

(Dr. rer. nat.)

dem Fachbereich Physik  
der Philipps-Universität Marburg  
vorgelegt von

Eva Kalinowski

aus Knurów

Marburg/Lahn im Februar 2002

Vom Fachbereich der Philipps-Universität  
als Dissertation am 22.04.2002 angenommen.

Erstgutachter: Prof. Dr. F. Gebhard

Zweitgutachter: Prof. Dr. B. Eckhardt

Tag der mündlichen Prüfung: 02.05.2002

# Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis . . . . .	5
<b>1 Einleitung</b>	<b>7</b>
<b>2 Begriffe und Definitionen</b>	<b>10</b>
2.1 Modell und Modellparameter . . . . .	10
2.1.1 Hamiltonoperator . . . . .	10
2.1.2 Teilchen-Loch Symmetrie . . . . .	12
2.1.3 Grundzustandseigenschaften . . . . .	13
2.2 Greenfunktionen . . . . .	14
<b>3 Störungstheorie im Limes starker Wechselwirkungen</b>	<b>16</b>
3.1 Kato-Takahashi Formalismus . . . . .	16
3.1.1 Allgemeine Herleitung . . . . .	16
3.1.2 Anwendung auf das Hubbard Modell . . . . .	19
3.1.3 Greenfunktion des unteren Hubbard-Bandes . . . . .	20
3.2 Greenfunktion in führender Ordnung . . . . .	21
3.2.1 Hubbard Modell . . . . .	21
3.2.2 Falicov-Kimball Modell . . . . .	23
<b>4 Falicov-Kimball Modell</b>	<b>25</b>
4.1 Exakte Lösung . . . . .	25
4.2 Greenfunktion zur Ordnung $1/U$ . . . . .	28
4.2.1 Formverändernde Anteile . . . . .	29
4.2.2 Renormierungsproblem . . . . .	29

4.2.3	Lösung des Renormierungsproblems: Effektives Lochhüpfen . .	31
4.2.4	Zustandsdichte zur Ordnung $1/U$ . . . . .	32
4.3	Greenfunktion zur Ordnung $1/U^2$ . . . . .	32
4.3.1	Formverändernde Anteile . . . . .	32
4.3.2	Effektiver Operator der Lochbewegung . . . . .	36
4.3.3	Zustandsdichte . . . . .	40
<b>5</b>	<b>Hubbard Modell</b>	<b>42</b>
5.1	Grundzustandseigenschaften . . . . .	42
5.1.1	Grundzustandsenergie bis zur Ordnung $U^{-3}$ . . . . .	42
5.2	Greenfunktion zur Ordnung $1/U$ . . . . .	46
5.2.1	Formverändernde Anteile . . . . .	46
5.2.2	Effektiver Operator der Lochbewegung . . . . .	47
5.2.3	Zustandsdichte zur Ordnung $1/U$ . . . . .	49
5.3	Greenfunktion zur Ordnung $1/U^2$ . . . . .	49
5.3.1	Formverändernde Anteile . . . . .	49
5.3.2	Effektiver Operator der Lochbewegung . . . . .	53
5.3.3	Zustandsdichte zur Ordnung $1/U^2$ . . . . .	55
5.3.4	Selbstenergie . . . . .	55
5.3.5	Momente der Zustandsdichte . . . . .	56
5.4	Einteilchen-Lücke zur Ordnung $1/U^3$ . . . . .	57
<b>6</b>	<b>Vergleiche mit analytischen Näherungsverfahren</b>	<b>62</b>
6.1	Hubbard-III Näherung . . . . .	62
6.2	Local Moment Zugang . . . . .	64
6.3	Iterierte Störungstheorie . . . . .	65
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>71</b>
	Literaturverzeichnis . . . . .	73
	Danksagung . . . . .	75

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Ausschnitt des Bethegitters mit $Z = 3$ nächsten Nachbarn . . . . .	11
4.1	Mott-Hubbard Lücke für Ladungsanregungen im Falicov-Kimball Modell	27
4.2	Zustandsdichte des unteren Hubbard-Bandes im Falicov-Kimball Modell bei $U = 1.5W$ und $U = \infty$ . . . . .	28
4.3	Erster Anteil der Hüpfprozesse auf dem Bethegitter in zweiter Ordnung in $1/U$ . . . . .	34
4.4	Zweiter Anteil der Hüpfprozesse auf dem Bethegitter in zweiter Ordnung in $1/U$ . . . . .	35
4.5	Zustandsdichte des unteren Hubbard-Bandes im Falicov-Kimball Modell, Vergleich der exakten Lösung mit der Störungsentwicklung . . . .	40
5.1	Graphen für die Berechnung der Grundzustandsenergie . . . . .	44
6.1	Zustandsdichte im Hubbard Modell: Hubbard-III Näherung versus $1/U$ -Entwicklung . . . . .	63
6.2	Mott-Hubbard Lücke: Hubbard-III Näherung, Local Moment Zugang und Störungsentwicklung im Vergleich . . . . .	65
6.3	Zustandsdichte im Hubbard Modell: Local Moment Zugang versus $1/U$ -Entwicklung . . . . .	66
6.4	Mott-Hubbard Lücke: Local Moment Zugang, Iterierte Störungstheorie und $1/U$ -Entwicklung im Vergleich . . . . .	67
6.5	Zustandsdichte im Hubbard Modell: Iterierte Störungstheorie versus $1/U$ -Entwicklung . . . . .	68

6.6	Imaginärteil der Einteilchen-Selbstenergie: Iterierte Störungstheorie versus $1/U$ -Entwicklung . . . . .	69
6.7	Realteil der Einteilchen-Selbstenergie: Iterierte Störungstheorie versus $1/U$ -Entwicklung . . . . .	70

# 1 Einleitung

Das Hubbard Modell stellt den minimalen Vielteilchen-Hamiltonoperator dar, welcher die Beschreibung zweier gegensätzlicher elektronischer Prozesse beinhaltet: Der kinetische Term führt durch Delokalisierung der Elektronen zum metallischen Verhalten, während die durch die intraatomare Coulombabstoßung  $U$  angenäherte Elektron-Elektron Wechselwirkung die Lokalisierung der Elektronen auf den Gitterplätzen und damit den isolierenden Zustand bevorzugt.

Das Modell wurde zunächst zur Erklärung des Ferromagnetismus in Übergangsmetallen [1, 2, 3] eingeführt und später zur Beschreibung des Para- [4] und Antiferromagnetismus [5], der Hochtemperatur-Supraleitung [6] und des durch Elektron-Elektron Wechselwirkungen induzierten Metall-Isolator Übergangs [7, 8] verwendet. Bei der Temperatur  $T = 0$  wird das Hubbard Modell durch die Elektronendichte  $0 \leq n \leq 2$  und die Stärke der lokalen Wechselwirkung  $U/W$  ( $W$  Bandbreite des nichtwechselwirkenden Systems) definiert. Die bei ganzzahligen  $n$  und großen Wechselwirkungen  $U$  vorhandene isolierende Phase ist durch die Existenz separater Hubbard-Subbänder gekennzeichnet. Bei der kritischen Wechselwirkung  $U_c = \mathcal{O}(W)$  berühren sich, für  $U < U_c$  überlappen die Bänder und die Zustandsdichte der Fermienergie ist endlich, das System ist metallisch. Der Mott-Hubbard Übergang ist ein Quanten-Phasenübergang, welcher die globalen Symmetrien des Systems nicht beeinflusst und damit von keiner spontanen Symmetriebrechung begleitet wird.

Die Frage, ob dieser innerhalb des Hubbard Modells stattfindende Übergang kontinuierlich oder diskontinuierlich ist, blieb Gegenstand einer bis heute nicht abgeschlossenen Diskussion. Brinkman und Rice [9] fanden mit Hilfe der Variationsmethode von Gutzwiller einen kontinuierlichen Übergang für das unendlichdi-

mensionale Modell: Bei Annäherung an die kritische Wechselwirkung innerhalb der metallischen Seite sinkt das Quasiteilchengewicht und verschwindet bei  $U_c$ , während sich dort, von der isolierenden Seite her kommend, die Lücke schließt. Dieses Szenario ist in der exakten Lösung des eindimensionalen  $1/r$  Hubbard Modells enthalten [10, 11].

Spätere Berechnungen [12] von Georges, Kotliar und Mitarbeitern sagten die Diskontinuität des Übergangs voraus: Die Einteilchen-Lücke nimmt einen endlichen Wert bei Verschwinden des Quasiteilchengewichtes an. Davor ist die Existenz einer vorgeformten Lücke und damit einer Koexistenzphase gegeben, die durch zwei kritische Wechselwirkungen,  $U_{c1} < U_{c2}$ , gekennzeichnet sind.

Weitere Arbeiten zum Mott-Hubbard Übergang in  $d = \infty$  Dimensionen unterstützten sowohl das erste [10, 13], als auch das zweite Szenario,[14]-[19]. Da noch keine exakte Lösung der verwendeten Gleichungen der Dynamischen Mean-Field-Theorie existiert, sind alle analytischen Ansätze [26, 27] notwendigerweise approximativ, während die numerischen Zugänge [14]-[19],[20] mit einer Reihe von Näherungen noch unklarer Konsequenzen behaftet sind.

Benötigt wird daher eine Testmethode, welche eine qualitative und quantitative Bewertung der verschiedenen analytischen und numerischen Verfahren erlaubt. Die systematische Störungstheorie in  $U/W$  für die metallische Phase und in  $W/U$  für die isolierende Phase stellt eine solche Testmethode dar. Verfahren, welche den Übergang richtig beschreiben sollen, müssen für die Grenzfälle korrekte Resultate liefern.

Die vorliegende Arbeit beschreibt den Mott-Hubbard Isolator störungstheoretisch in  $W/U$  und liefert Vorhersagen über die kritischen Werte am Metall-Isolator Übergang.

Die Betrachtung bezieht sich auf das Bethegitter unendlicher Koordinationszahl. Die Abwesenheit geschlossener Schleifen auf diesem Gittertyp vereinfacht die Berechnung der Greenfunktionen erheblich. Die Einteilchen-Zustandsdichte am Bethegitter ist auf ein endliches Intervall der Energieachse beschränkt, was die genaue Berechnung der Lücke im Anregungsspektrum ermöglicht. Im korrespondierenden Heisenbergmodell sind alle Kopplungen gleich antiferromagnetisch und für große  $U$  entspricht das System einem völlig frustrierten Magnet ohne Tendenz zur Ord-



nung. Die Betrachtung des Mott-Übergangs vom paramagnetischen Isolator zum paramagnetischen Metall ist daher gerechtfertigt. Als Konsequenz ergibt sich jedoch eine endliche Grundzustandsentropie für  $T = 0$ .

Die Arbeit ist folgendermaßen gegliedert: Im zweiten Kapitel werden das Hubbard Modell, das als Testmodell verwendete Falicov-Kimball Modell, die zu berechnende Einteilchen-Greenfunktion und weitere Definitionen vorgestellt.

Das dritte Kapitel enthält die Erläuterung der Kato-Takahashi Störungstheorie für entartete Systeme mit der Berechnung der Einteilchen-Greenfunktion in führender Ordnung als erster Anwendung.

Das vierte Kapitel zeigt die Lösung des nach der Entwicklung auftretenden Resummierungsproblems und die genaue Übereinstimmung der mit der Störungsentwicklung einschließlich zweiter Ordnung in  $1/U$  ermittelten Ergebnisse mit den bekannten exakten Resultaten für das Falicov-Kimball Modell.

Die erfolgreiche Methode findet im fünften Kapitel Anwendung auf das Hubbard Modell, für welches zunächst die Grundzustandseigenschaften vorgestellt werden. Anschließend werden die Greenfunktion und die hieraus berechenbaren Größen einschließlich zweiter Ordnung in  $1/U$  ermittelt. Aus der Energielücke in dritter Ordnung in  $1/U$  wird der Übergang abgeschätzt.

Das sechste Kapitel beinhaltet den Vergleich der Vorhersagen verschiedener analytischer Verfahren (Hubbard-III Näherung, Local Moment Zugang und Iterierte Störungstheorie) mit der Störungsentwicklung.

Die Arbeit schließt mit einer kurzen Zusammenfassung, Kapitel sieben.

Ein Teil der hier vorgestellten Ergebnisse ist veröffentlicht [28].

## 2 Begriffe und Definitionen

Im ersten Abschnitt dieses einführenden Kapitels werden das verwendete Hubbard Modell, die Eigenschaften des mit ihm beschriebenen Systems sowie das als Testmodell genutzte Falicov-Kimball Modell vorgestellt. Der zweite Abschnitt enthält die Definitionen der Einteilchen-Greenfunktion. Mit ihrer Kenntnis werden wichtige Systemgrößen, wie z. B. die Einteilchen-Zustandsdichte und die daraus entnehmbare Energielücke berechnet.

### 2.1 Modell und Modellparameter

#### 2.1.1 Hamiltonoperator

In der vorliegenden Arbeit wird das repulsive Einband Hubbard Modell [1]

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{HM}} &= \frac{-t}{\sqrt{Z}} \sum_{\langle \mathbf{j}, \mathbf{l} \rangle} \sum_{\sigma} \left( \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{l}\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{l}\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma} \right) + U \sum_{\mathbf{j}} \hat{n}_{\mathbf{j}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{j}\downarrow} \\ &= \hat{T} + U \hat{D}\end{aligned}\tag{2.1}$$

betrachtet. Dabei erzeugt (vernichtet)  $\hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^{\dagger}$  ( $\hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}$ ) ein Elektron mit Spin  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  am Gitterplatz  $\mathbf{j}$  und  $\hat{n}_{\mathbf{j}\sigma} = \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}$  stellt den entsprechenden Besetzungszahloperator dar. Die Summe im kinetischen Anteil läuft über alle Paare  $\langle \mathbf{j}, \mathbf{l} \rangle$  nächster Nachbarn, wobei jedes Paar nur einmal gezählt wird,  $t$  ist die Hüpfamplitude, die als Energieeinheit dient,  $t \equiv 1$ . Der Wechselwirkungsanteil beschreibt die intraatomare Coulombabstoßung der Elektronen.

Da ausschließlich die isolierende Phase des Systems betrachtet werden soll, wird

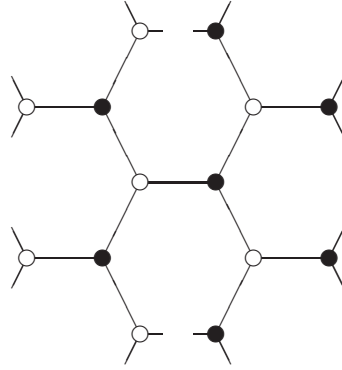


Abbildung 2.1: Ausschnitt des Bethegitters mit  $Z = 3$  nächsten Nachbarn. Die Gitterpunkte  $\circ \in A$ ,  $\bullet \in B$  sind alternierend angeordnet, das Bethegitter ist also ein  $A$ - $B$  Gitter.

im folgenden halbe Bandfüllung angenommen, das heißt die Anzahl  $N$  der Elektronen gleicht der Anzahl  $L$  der Gitterplätze. Alle Berechnungen sind im thermodynamischen Limes,  $N, L \rightarrow \infty$  mit  $n = N/L = 1$  fest, gültig und beziehen sich auf ein Bethegitter mit  $Z$  nächsten Nachbarn im Limes  $Z \rightarrow \infty$ . Auf dem Bethegitter können keine geschlossenen Wege beschrieben werden. Abbildung 2.1 zeigt einen Ausschnitt des Bethegitters mit  $Z = 3$ .

Für weitere Betrachtungen ist es günstig, den Hamiltonoperator (2.1) um einen zusätzlichen Term zu ergänzen, um die Teilchen-Loch Symmetrie explizit zu machen ( $\hat{N} = \sum_{j\sigma} \hat{n}_{j\sigma}$ ):

$$\hat{H}_{\text{HM}} \rightarrow \hat{H} = \hat{H}_{\text{HM}} - \frac{U}{2} \left( \hat{N} - \frac{L}{2} \right). \quad (2.2)$$

Der verwendete Hamiltonoperator lautet damit

$$\hat{H} = \frac{-t}{\sqrt{Z}} \sum_{\langle j,l \rangle} \sum_{\sigma} \left( \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{l\sigma} + \hat{c}_{l\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} \right) + U \sum_j \left( \hat{n}_{j\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left( \hat{n}_{j\downarrow} - \frac{1}{2} \right). \quad (2.3)$$

Desweiteren wird das Falicov-Kimball Modell (“vereinfachtes Hubbard Modell”)

betrachtet

$$\begin{aligned}\hat{H}^{\text{FK}} &= \frac{-t}{\sqrt{Z}} \sum_{\langle \mathbf{j}, \mathbf{l} \rangle} (\hat{c}_{\mathbf{j}}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{l}} + \hat{c}_{\mathbf{l}}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{j}}) + U \sum_{\mathbf{j}} \left( \hat{c}_{\mathbf{j}}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{j}} - \frac{1}{2} \right) \left( \hat{f}_{\mathbf{j}}^{\dagger} \hat{f}_{\mathbf{j}} - \frac{1}{2} \right) \\ &= \hat{T}^{\text{FK}} + \hat{D}^{\text{FK}} - \frac{U}{2} \sum_{\mathbf{j}} (\hat{c}_{\mathbf{j}}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{j}} + \hat{f}_{\mathbf{j}}^{\dagger} \hat{f}_{\mathbf{j}}) + \frac{UL}{4} .\end{aligned}\quad (2.4)$$

Darin wird eine der Elektronenspezies,  $\hat{f}_{\mathbf{j}}$  (z. B. die Elektronen mit Spin  $\uparrow$ ), als immobil angenommen.

### 2.1.2 Teilchen-Loch Symmetrie

Die Elektron-Loch Transformation

$$\mathcal{T}_{\text{ph}} : \quad \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^{\dagger} \mapsto \zeta_{\mathbf{j}} \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma} \quad ; \quad \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma} \mapsto \zeta_{\mathbf{j}} \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^{\dagger} \quad (2.5)$$

mit

$$\zeta_{\mathbf{j}} = \begin{cases} +1 & \mathbf{j} \in A \\ -1 & \mathbf{j} \in B \end{cases} \quad (2.5')$$

generiert eine Abbildung von  $\hat{H}$  auf sich selbst. Diese Symmetrie wird im folgenden genutzt werden.

Als erste Anwendung wird gezeigt, daß das chemische Potential  $\mu = 0$  halbe Bandfüllung für alle  $T \geq 0$  garantiert. Es ist nach Definition

$$\langle \hat{N} \rangle(\mu) = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \text{Sp} \left[ \exp \left( -\beta(\hat{H} - \mu \hat{N}) \right) \right] \quad (2.6)$$

und daher mit (2.3)

$$\begin{aligned}\langle \hat{N} \rangle(\mu) &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \text{Sp} \left[ \exp \left( -\beta(\hat{H} - \mu(2L - \hat{N})) \right) \right] \\ &= 2L - \langle \hat{N} \rangle(-\mu) .\end{aligned}$$

Also gilt  $\langle \hat{N} \rangle(0) = L$ .

### 2.1.3 Grundzustandseigenschaften

Im Hauptteil der Arbeit erfolgt die Untersuchung des Mott-Hubbard Isolators, welcher durch die Abwesenheit langreichweitiger Ordnung gekennzeichnet ist [10]. Beim Falicov-Kimball Modell bedeutet dies, daß jeder Gitterplatz mit der Wahrscheinlichkeit  $p = 1/2$  von einem immobilen Elektron besetzt ist und keine Korrelationen der Besetzungen verschiedener Gitterplätze vorliegen.

Wie im Kapitel 5.1 gezeigt wird, ist im Mott-Hubbard Isolator jedes globale Singulett ( $S_{\text{tot}} = 0$ ) Grundzustand. Im thermodynamischen Limes folgt daraus, daß  $\langle S_j^z \rangle = 0$  für alle  $j$ , so daß die Besetzungswahrscheinlichkeiten der Gitterplätze für  $\uparrow$ -Spin-Elektronen und  $\downarrow$ -Spin-Elektronen gleich sind,  $p_\sigma = 1/2$ . Zudem liegen keine Korrelationen zwischen den Gitterplätzen vor.

Die Anzahl aller Singulettts ist

$$\mathcal{N}_{S_{\text{tot}}=0} = \binom{L}{L/2} - \binom{L}{L/2-1} = \frac{2}{L+2} \binom{L}{L/2} \approx \frac{2^L}{L}, \quad (2.7)$$

denn die Anzahl der Zustände mit  $S_{\text{tot}}^z = \sum_j S_j^z = 0$  beträgt  $\binom{L}{L/2}$ , wobei darin alle Singulettts, alle Triplettts, für welche  $S_{\text{tot}}^z = 0$  gilt, und alle Zustände mit  $S_{\text{tot}} > 1$  und  $S_{\text{tot}}^z = 0$  enthalten sind; außer den Singulettts besitzen die Spinzustände eine Komponente im  $S_{\text{tot}}^z = 1$  Unterraum. Dieser enthält  $\binom{L}{L/2-1}$  Zustände. Damit ist

$$s(S_{\text{tot}} = 0) = \ln \mathcal{N}_{S_{\text{tot}}=0} = \ln(2) - \mathcal{O}(\ln(L)/L). \quad (2.8)$$

Die Zustandsdichte der mobilen Elektronen ohne Wechselwirkung ( $U = 0$ ) ist gegeben durch

$$\rho(\omega) = \frac{2}{\pi W} \sqrt{4 - \left(\frac{4\omega}{W}\right)^2}, \quad |\omega| \leq W/2, \quad (2.9)$$

wobei  $W = 4$  die Bandbreite darstellt [21]. Für die Zustandsdichte im Falicov-Kimball Modell gilt

$$\rho^{\text{FK}}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{2 - \omega^2}, \quad |\omega| \leq \sqrt{2}. \quad (2.10)$$

## 2.2 Greenfunktionen

Die zeitabhängige lokale Einteilchen-Greenfunktion für die Temperatur  $T = 0$  lautet [22]

$$\begin{aligned} G(t) &= -i \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \sum_{\sigma} \left\langle \hat{\mathcal{T}} \left[ \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}(t) \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^{\dagger} \right] \right\rangle \\ &= -i \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \sum_{\sigma} \left( \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}(t) \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^{\dagger} \right\rangle \Theta(t) - \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}(t) \right\rangle \Theta(-t) \right) . \end{aligned} \quad (2.11)$$

Dabei stellt  $\hat{\mathcal{T}}$  den Zeitordnungsoperator dar,  $\hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}(t)$  ist der Vernichtungsoperator im Heisenbergbild

$$\hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}(t) = \exp(i\hat{H}t) \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma} \exp(-i\hat{H}t) , \quad \hbar \equiv 1 ,$$

und  $\langle \dots \rangle$  bedeutet den Mittelwert über alle Grundzustände mit der Energie  $E_0$ . Da am Bethegitter kein Gitterplatz ausgezeichnet ist, liefert jeder Summand in (2.11) den gleichen Beitrag.

Verwendet man die Integraldarstellung

$$\Theta(t) = - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\eta} \quad (\eta \rightarrow 0^+)$$

der Thetafunktion, ergibt sich die Fouriertransformierte der Greenfunktion zu

$$\begin{aligned} G(\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} G(t) \\ &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}\sigma} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^{\dagger} \left[ \omega + (\hat{H} - E_0) - i\eta \right]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma} \right\rangle \\ &\quad + \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}\sigma} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma} \left[ \omega - (\hat{H} - E_0) + i\eta \right]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^{\dagger} \right\rangle . \end{aligned} \quad (2.12)$$

Aufgrund der im vorigen Abschnitt erwähnten Teilchen-Loch Symmetrie gilt

$$G(\omega) = -G(-\omega) . \quad (2.13)$$

Wegen der Existenz einer Lücke in der Zustandsdichte des Mott-Hubbard Isolators können die Summanden in (2.12) als Beiträge des unteren (UHB) und des oberen (OHB) Hubbard-Bandes identifiziert werden

$$G(\omega) = G_{\text{UHB}}(\omega) + G_{\text{OHB}}(\omega) , \quad (2.14)$$

mit

$$G_{\text{UHB}}(\omega) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}\sigma} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^\dagger \left[ \omega + (\hat{H} - E_0) - i\eta \right]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma} \right\rangle . \quad (2.15)$$

Weil

$$G_{\text{OHB}}(\omega) = -G_{\text{UHB}}(-\omega) \quad (2.16)$$

gilt, genügt es, die Greenfunktion des unteren Hubbard-Bandes zu berechnen.

Der Imaginärteil der Greenfunktion (2.12) liefert die Zustandsdichte des Systems [22]

$$D(\omega) = -\frac{1}{\pi} [\Theta(\omega) - \Theta(-\omega)] \Im G(\omega) . \quad (2.17)$$

Aufgrund der Teilchen-Loch Symmetrie ist  $D_{\text{OHB}}(\omega) = D_{\text{UHB}}(-\omega)$ , mit der für ein im Grundzustand erzeugtes Loch gültigen Verteilung  $D_{\text{UHB}}(\omega)$

$$D_{\text{UHB}}(\omega) = \frac{1}{\pi} \Im G_{\text{UHB}}(\omega) , \quad \mu_{\text{UHB}}^- \leq \omega \leq \mu_{\text{UHB}}^+ < 0 . \quad (2.18)$$

Die Lücke im Anregungsspektrum ergibt sich damit zu

$$\Delta = 2|\mu_{\text{UHB}}^+| > 0 . \quad (2.19)$$

Für das Falicov-Kimball Modell wird die das untere Hubbard-Band beschreibende Greenfunktion der mobilen Elektronen betrachtet

$$G_{\text{UHB}}^{\text{FK}}(\omega) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger \left[ \omega + (\hat{H} - E_0) - i\eta \right]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle . \quad (2.20)$$

Auch hier ist das Spektrum symmetrisch bezüglich  $\omega = 0$ , es gilt ebenfalls

$$G^{\text{FK}}(\omega) = G_{\text{UHB}}^{\text{FK}}(\omega) - G_{\text{UHB}}^{\text{FK}}(-\omega) , \quad (2.21)$$

und sinngemäß die Beziehungen (2.16)-(2.19).

## 3 Störungstheorie im Limes starker Wechselwirkungen

Die approximative Berechnung der im vorangehenden Kapitel vorgestellten Greenfunktionen beginnt mit der Anwendung eines auf T.Kato zurückgehenden störungstheoretischen Ansatzes. Dabei wird die Entwicklung einer Resolvente in eine Potenzreihe um den Störungsparameter genutzt, um den Projektor auf den Eigenraum des gestörten Hamiltonoperators zu erhalten. Mit dessen Hilfe wird dann eine Transformation erzeugt, welche die Definition effektiver Operatoren und die Lösung des Eigenwertproblems über dem Eigenraum des ungestörten Hamiltonoperators ermöglicht. Im ersten Abschnitt dieses Kapitels wird das Katosche Verfahren genau erläutert, im zweiten Abschnitt erfolgt die Berechnung der Greenfunktion in führender Ordnung.

### 3.1 Kato-Takahashi Formalismus

#### 3.1.1 Allgemeine Herleitung

Betrachte folgende Resolvente des Operators  $\hat{H}$  im Punkt  $\omega \in \mathbb{C}$

$$\hat{G}(\omega) = \frac{1}{\omega - \hat{H}} \quad (3.1)$$

und den diskreten Teil  $\dots, E_j, E_{j+1}, \dots$  des Eigenwertspektrums von  $\hat{H}$ . Sei  $\hat{Q}_i$  der Projektor auf den zu  $E_i$  gehörenden Eigenraum

$$\hat{H}\hat{Q}_i = E_i\hat{Q}_i, \quad \text{mit} \quad \hat{Q}_i\hat{Q}_j = \delta_{ij} \quad \text{und} \quad \sum_i \hat{Q}_i = \hat{1}. \quad (3.2)$$



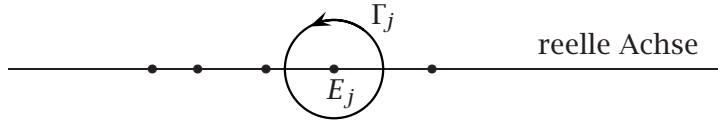
Mit (3.1) folgt

$$\hat{G}(\omega) = \sum_i \frac{\hat{Q}_i}{\omega - E_i} . \quad (3.3)$$

Jeder Eigenwert  $E_j$  von  $\hat{H}$  stellt somit einen einfachen Pol der Resolvente dar, dessen Residuum durch  $\hat{Q}_j$  gegeben ist

$$\hat{Q}_j = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_j} d\omega \hat{G}(\omega) . \quad (3.4)$$

Dabei bildet  $\Gamma_j$  einen um den Pol  $E_j$  geschlossenen Weg, welcher alle anderen Pole ausschließt:



Gegeben sei nun der zeitunabhängige Hamiltonoperator  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}$  als Summe des ungestörten Anteils  $\hat{H}_0$  und der Störung  $\lambda \hat{V}$ , wobei  $\lambda$  einen reellen Parameter darstellt. Mit

$$\hat{G}_0(\omega) = \frac{1}{\omega - \hat{H}_0} \quad (3.5)$$

erhält man

$$\hat{G}(\omega) = \frac{1}{\omega - \hat{H}_0 - \lambda \hat{V}} = \frac{1}{\omega - \hat{H}_0} + \frac{1}{\omega - \hat{H}_0} \lambda \hat{V} \frac{1}{\omega - \hat{H}_0 - \lambda \hat{V}} .$$

Damit ist  $\hat{G}(\omega)$  Lösung der Integralgleichung

$$\hat{G}(\omega) = \hat{G}_0(\omega) \left( 1 + \lambda \hat{V} \hat{G}(\omega) \right) , \quad (3.6)$$

welche durch iteratives Einsetzen auf folgende Reihenentwicklung um den Störparameter führt

$$\hat{G}(\omega) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \hat{G}_0(\omega) \left( \hat{V} \hat{G}_0(\omega) \right)^n . \quad (3.7)$$

Für den Projektor (3.4) folgt mit dem obigen Ausdruck

$$\begin{aligned}\hat{Q}_j &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_j^*} d\omega \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \hat{G}_0(\omega) \left( \hat{V} \hat{G}_0(\omega) \right)^n \\ &= \hat{Q}_j^0 + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \hat{A}_n ,\end{aligned}\tag{3.8}$$

wobei

$$\hat{A}_n = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_j^*} d\omega \hat{G}_0(\omega) \left( \hat{V} \hat{G}_0(\omega) \right)^n .\tag{3.9}$$

Hierbei beschreibt  $\Gamma_j^*$  einen geschlossenen Weg um den Eigenwert  $E_j$  des Operators  $\hat{H}$  und den Eigenwert  $E_j^0$  des ungestörten Operators  $\hat{H}_0$ , alle anderen Eigenwerte sind ausgeschlossen. Da  $E_j \rightarrow E_j^0$  wenn  $\lambda \rightarrow 0$ , existiert ein solcher Weg mit Sicherheit für genügend kleines  $\lambda$ . Die einzige innerhalb  $\Gamma_j^*$  liegende Singularität des Operators  $\hat{G}_0(\omega) (\hat{V} \hat{G}_0(\omega))^n$  ist daher durch den in  $E_j^0$  liegenden Pol der Ordnung  $n+1$  gegeben.  $\hat{A}_n$  (3.9) stellt das Residuum dieses Pols dar.

Zur Berechnung des Residuums wird  $\hat{G}_0(\omega)$  in eine Laurentreihe um  $E_j^0$  entwickelt. Es gilt

$$\begin{aligned}\hat{G}_0(\omega) &= \frac{\hat{Q}_j^0}{\omega - E_j^0} + \sum_{i \neq j} \frac{\hat{Q}_i^0}{\omega - E_i^0} \\ &= \frac{\hat{Q}_j^0}{\omega - E_j^0} + \sum_{i \neq j} \frac{1}{E_j^0 - E_i^0} \left( \frac{\hat{Q}_i^0}{\frac{\omega - E_j^0}{E_j^0 - E_i^0} + 1} \right) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^{k-1} (\omega - E_j^0)^{k-1} \hat{S}^k\end{aligned}\tag{3.10}$$

mit der Definition

$$\hat{S}^k = \begin{cases} -\hat{Q}_j^0 & k = 0 \\ \sum_{i \neq j} \frac{\hat{Q}_i^0}{(E_j^0 - E_i^0)^k} & k \geq 1 . \end{cases}\tag{3.11}$$

Der Koeffizient  $\hat{A}_n$  von  $(\omega - E_j^0)^{-1}$  in der Laurententwicklung des Integranden

$\hat{G}_0(\omega)(\hat{V}\hat{G}_0(\omega))^n$  ergibt sich somit zu

$$\hat{A}_n = - \sum_{\substack{k_1+k_2+\dots+k_{n+1}=n \\ k_i \geq 0 \ \forall i}} \hat{S}^{k_1} \hat{V} \hat{S}^{k_2} \hat{V} \dots \hat{V} \hat{S}^{k_{n+1}}, \quad (3.12)$$

und für den Projektor (3.8) folgt schließlich

$$\hat{Q}_j = \hat{Q}_j^0 - \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \sum_{\substack{k_1+k_2+\dots+k_{n+1}=n \\ k_i \geq 0 \ \forall i}} \hat{S}^{k_1} \hat{V} \hat{S}^{k_2} \hat{V} \dots \hat{V} \hat{S}^{k_{n+1}}. \quad (3.13)$$

### 3.1.2 Anwendung auf das Hubbard Modell

Man betrachte den Hamiltonoperator des Hubbard Modells (2.1) im Limes starker Wechselwirkung und setze

$$\hat{H}_0 = U\hat{D}, \quad (3.14)$$

während der kinetische Anteil mit dem Störterm identifiziert werden soll,

$$\lambda\hat{V} = \hat{T}. \quad (3.15)$$

Die Konstante  $-U/2(\hat{N} - L/2)$  wird gesondert betrachtet. Innerhalb der  $n$ -ten Ordnung erfaßt der Projektor (3.13) somit sämtliche durch  $n$ -fache Anwendung der Störung  $\hat{T}$  generierten Elektronentransferprozesse.

Die Grundzustände  $|\Phi_n^{(0)}\rangle$  von  $U\hat{D}$  enthalten keine Doppelbesetzungen, die jeweiligen Unterräume der  $N \leq L$  Elektronensysteme sind von der Dimension  $\binom{L}{N}2^N$ . Sei  $\hat{P}_j = \hat{Q}_j^0$  der Projektor auf die Unterräume mit  $j$  Doppelbesetzungen und  $\hat{P} = \hat{Q}_{j=0}$ . Man definiere die Transformation  $\hat{\Gamma}$  mittels

$$\hat{\Gamma} = \hat{P}\hat{P}_0 \left( \hat{P}_0\hat{P}\hat{P}_0 \right)^{-1/2}, \quad (3.16)$$

wobei die Wurzel des Operators durch ihre Reihenentwicklung interpretiert wird

$$\left( \hat{P}_0\hat{P}\hat{P}_0 \right)^{-1/2} \equiv \hat{P}_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!} \left[ \hat{P}_0(\hat{P}_0 - \hat{P})\hat{P}_0 \right]^n.$$

Es gilt  $\hat{P}\hat{\Gamma} = \hat{\Gamma}$ . Mit  $|\Psi_n^{(0)}\rangle = \hat{\Gamma}|\Phi_n^{(0)}\rangle$  lautet die Schrödingergleichung

$$\hat{H}\hat{\Gamma}|\Phi_n^{(0)}\rangle = E_0\hat{\Gamma}|\Phi_n^{(0)}\rangle. \quad (3.17)$$

Aufgrund der Pseudounitarität von  $\hat{\Gamma}$  im Unterraum der Zustände ohne Doppelbesetzung,

$$\hat{\Gamma}^\dagger \hat{\Gamma} = \hat{P}_0, \quad (3.18)$$

gilt  $\langle \Phi_n^{(0)} | \Phi_m^{(0)} \rangle = \langle \Psi_n^{(0)} | \Psi_m^{(0)} \rangle$  für die Überlappungsintegrale. Insbesondere bleiben Norm und Orthogonalität erhalten.

Die Schrödingergleichung (3.17) ist äquivalent zu

$$\hat{h} |\Phi_n^{(0)}\rangle = 0, \quad \hat{h} = \hat{\Gamma}^\dagger \hat{H} \hat{\Gamma} - E_0 \hat{P}_0. \quad (3.19)$$

Dementsprechend folgt für die Fermioperatoren

$$\hat{c}_{j\sigma}^\dagger \mapsto \tilde{c}_{j\sigma}^\dagger = \hat{\Gamma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{\Gamma}, \quad \hat{c}_{j\sigma} \mapsto \tilde{c}_{j\sigma} = \hat{\Gamma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \hat{\Gamma}. \quad (3.20)$$

Die durch  $\hat{\Gamma}$  transformierten Operatoren wirken im Eigenraum von  $U\hat{D}$ , die Eigenspektren ändern sich durch die Transformation dagegen nicht.

### 3.1.3 Greenfunktion des unteren Hubbard-Bandes

Als Basis wird  $|\Phi_s^{(0)}\rangle = c_{1\sigma_1}^\dagger c_{2\sigma_2}^\dagger \cdots c_{L\sigma_L}^\dagger |0\rangle$  benutzt,  $s$  bezeichnet die Menge aller Spinkonfigurationen  $\sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_L$ ,  $|0\rangle$  ist der Vakuumzustand. Diese Basis spannt den Grundzustandsraum von  $U\hat{D}$  bei halber Bandfüllung auf. Die Greenfunktion des unteren Hubbard-Bandes ist dann gegeben durch

$$G_{\text{UHB}}(\omega) = \frac{1}{L} \sum_{j\sigma} \left\langle \tilde{c}_{j\sigma}^\dagger \left[ \omega + U/2 + \hat{h} - i\eta \right]^{-1} \tilde{c}_{j\sigma} \right\rangle, \quad (3.21)$$

wobei  $\langle \cdots \rangle$  die Mittelung über die Basiszustände  $|\Phi_s^{(0)}\rangle$  bedeutet. Der Term  $+U/2$  stammt vom Beitrag  $-U/2(\hat{N} - L/2)$  und berücksichtigt, daß ein Teilchen aus dem halbgefüllten Zustand entfernt wurde. Unter Beachtung der Definition (3.11) gilt bis einschließlich zweiter Ordnung in  $1/U$

$$\begin{aligned} \tilde{c}_{j\sigma} &= \hat{P}_0 \hat{c}_{j\sigma} \hat{P}_0 + \hat{P}_0 \hat{c}_{j\sigma} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0 + \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{c}_{j\sigma} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0 + \hat{P}_0 \hat{c}_{j\sigma} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0 \\ &\quad - \frac{1}{2} \left( \hat{P}_0 \hat{c}_{j\sigma} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{P}_0 + \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{P}_0 \hat{c}_{j\sigma} \hat{P}_0 \right), \end{aligned} \quad (3.22)$$

während der transformierte Hamiltonoperator bis einschließlich dritter Ordnung lautet

$$\hat{h} = \frac{U}{2} (L - 2\hat{N}) + \hat{h}_0 + \hat{h}_1 + \hat{h}_2 + \hat{h}_3 + \dots, \quad (3.23)$$

mit

$$\begin{aligned} \hat{h}_0 &= \hat{P}_0 \hat{T} \hat{P}_0, \\ \hat{h}_1 &= \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0 - E_0^{(1)}, \\ \hat{h}_2 &= \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0 - \frac{1}{2} (\hat{P}_0 \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{P}_0 + \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{P}_0), \\ \hat{h}_3 &= \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0 - \frac{1}{2} (\hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{P}_0 + \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0) \\ &\quad - \frac{1}{2} (\hat{P}_0 \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0 + \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{P}_0 + \\ &\quad + \hat{P}_0 \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{P}_0 + \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{P}_0) \\ &\quad + \frac{1}{2} (\hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^3 \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{P}_0 + \hat{P}_0 \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^3 \hat{T} \hat{P}_0) - E_0^{(3)}, \end{aligned} \quad (3.24)$$

wobei die Beiträge folgender Ordnungen der Störungsentwicklung zur Grundzustandsenergie des Isolators,  $E_0^{(0)} = 0$ ,  $E_0^{(1)}$ ,  $E_0^{(2)} = 0$  und  $E_0^{(3)}$  im Hubbard bzw. Falicov-Kimball Modell verwendet und  $\lambda = 1$  gesetzt wurden.

Bei Betrachtung des Falicov-Kimball Modells wird der Operator  $\hat{T}$  durch  $\hat{T}^{\text{FK}}$  ersetzt und die Spinindizierung fortgelassen.

## 3.2 Greenfunktion in führender Ordnung

### 3.2.1 Hubbard Modell

Im folgenden soll der Term führender Ordnung der Entwicklung (3.21) der Greenfunktion

$$G_0(z) = \frac{1}{L} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle \quad (3.25)$$

im Punkt  $z \in \mathbb{C}$  berechnet werden. Am Ende der Rechnungen ist  $z = \omega + U/2 - i\eta$  zu setzen. Mit Anwendung der Identität

$$\frac{1}{z + \hat{h}_0} = \frac{1}{z} \sum_{n=0}^{\infty} \left( -\frac{\hat{h}_0}{z} \right)^n$$

erhält man folgende, für  $|z| > 2$  konvergente Entwicklung

$$G_0(z) = \frac{1}{z} \frac{1}{L} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \left( -\frac{\hat{h}_0}{z} \right)^n \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle . \quad (3.26)$$

Darin beinhaltet der Ausdruck  $n$ -ter Ordnung die Menge aller durch  $n$  Schritte generierten Pfade eines in einem Spinbad erzeugten Loches, welche am selben Gitterplatz beginnen und enden. Da auf dem Bethegitter keine geschlossenen Schleifen ausführbar sind, bleibt die Spinkonfiguration dort invariant, das heißt, das Loch bewegt sich wie ein freies Teilchen auf einem leeren Gitter. Dabei tragen nur Terme gerader Ordnung zur Summe (3.26) bei.

Bezeichnet man die Gesamtheit aller Pfade, bei denen der Ausgangszustand des Loches nicht als Zwischenzustand auftritt mit  $S(z)$ , dann erfaßt  $[S(z)]^{n+1}$  alle Pfade, innerhalb derer das Loch seinen Ausgangspunkt  $n$  mal durchschreitet und die Greenfunktion lautet

$$G_0(z) = \frac{1}{z} \left( 1 + S(z) + S(z)^2 + \dots \right) = \frac{1}{z(1 - S(z))} . \quad (3.27)$$

Alle zu  $S(z)$  beitragenden Wege beginnen mit einem Sprung des Loches auf einen der  $Z$  Nachbarplätze, und kehren nach Durchschreiten von Pfaden über den jeweiligen Nachbarn zum Ausgangsort, welcher während des gesamten Exkurses gemieden wird, zurück. Die letztere Einschränkung ist aufgrund des verschwindenden statistischen Gewichtes der ausgeschlossenen Pfade irrelevant im Limes  $Z \rightarrow \infty$ . Damit ergibt sich  $S(z)$  als Lösung der quadratischen Gleichung

$$S(z) = Z \left( \frac{1}{z\sqrt{Z}} \right)^2 \sum_{n=0}^{\infty} [S(z)]^n = \frac{1}{z^2(1 - S(z))} , \quad (3.28)$$

und es folgt

$$G_0(z) = zS(z) = \frac{1}{2} \left( z \pm \sqrt{z^2 - 4} \right) . \quad (3.29)$$

Die Wahl der Wurzel in  $S(z)$  gewährleistet das korrekte Verhalten von  $G_0(z)$  für  $|z| \rightarrow \infty$ .

Nach analytischem Fortsetzen des Ausdrucks (3.29) in die gesamte komplexe Ebene wird dessen Gültigkeit für alle  $z$  angenommen und die Zustandsdichte des unteren Hubbard-Bandes ergibt sich nach (2.18) zu

$$D_0(\omega) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{4 - (\omega + U/2)^2} = \rho(\omega + U/2), \quad |\omega + U/2| \leq 2, \quad (3.30)$$

wobei  $z = \omega + U/2 - i\eta$  gesetzt wurde.

Wie erwartet, liegt die um  $U/2$  verschobene Dichte des nichtwechselwirkenden Systems (2.9) vor. Mit  $\mu_{\text{UHB}}^+ = -U/2 + 2$  folgt für die Energielücke  $\Delta$  (2.19) in führender Ordnung schließlich

$$\Delta_0(U) = U - 4. \quad (3.31)$$

### 3.2.2 Falicov-Kimball Modell

Am Falicov-Kimball Modell verläuft die Berechnung analog, wobei zu beachten ist, daß die Erzeugung eines Loches am Ort  $\mathbf{j}$  die Wahrscheinlichkeit  $p = 1/2$  besitzt und ein Sprung des Loches zum Nachbarplatz ebenfalls mit der Wahrscheinlichkeit  $p = 1/2$  erfolgt, da der Platz mit einem immobilen Elektron besetzt sein könnte.

Für die Greenfunktion erhält man hier

$$G_0^{\text{FK}}(z) = \frac{1}{2} \frac{1}{z} \sum_{n=0}^{\infty} [S^{\text{FK}}(z)]^n = \frac{1}{2z(1 - S^{\text{FK}}(z))}, \quad (3.32)$$

und mit

$$S^{\text{FK}}(z) = \frac{1}{2} z \left( \frac{1}{z\sqrt{z}} \right)^2 \sum_{n=0}^{\infty} [S^{\text{FK}}(z)]^n = \frac{1}{2z^2(1 - S^{\text{FK}}(z))} \quad (3.33)$$

ist

$$G_0^{\text{FK}}(z) = zS^{\text{FK}}(z) = \frac{1}{2} \left( z \pm \sqrt{z^2 - 2} \right). \quad (3.34)$$

Damit wird der bekannte exakte Ausdruck der führenden Ordnung der Greenfunktion (siehe Kapitel 4.1) reproduziert.

Nach analytischem Fortsetzen in die gesamte komplexe Ebene gilt

$$D_0^{\text{FK}}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{2 - (\omega + U/2)^2} = \rho^{\text{FK}}(\omega + U/2), \quad |\omega + U/2| \leq \sqrt{2} \quad (3.35)$$

für die Zustandsdichte der unteren Hubbard-Bandes, wobei auch hier  $z = \omega + U/2 - i\eta$  gesetzt wurde. Mit  $[\mu_{\text{UHB}}^{\text{FK}}]^+ = -U/2 + \sqrt{2}$  folgt die Lücke im Spektrum des Falicov-Kimball Modells

$$\Delta_0^{\text{FK}}(U) = U - 2\sqrt{2}. \quad (3.36)$$



## 4 Falicov-Kimball Modell

Das vorliegende Kapitel befaßt sich mit der Berechnung von Korrekturen höherer Ordnung in  $1/U$  zu den im letzten Abschnitt abgeleiteten Termen für die Greenfunktion, die Zustandsdichte und die Energielücke im Falicov-Kimball Modell. Im ersten Abschnitt werden die bekannten exakten Ausdrücke der gesuchten Größen vorgestellt, welche im zweiten Abschnitt mit den aus der Störungsentwicklung resultierenden Korrekturen einschließlich erster Ordnung, im dritten Abschnitt mit den Korrekturen einschließlich zweiter Ordnung in  $1/U$  verglichen werden.

### 4.1 Exakte Lösung

Während seiner Bewegung auf dem Gitter wird das mobile Elektron an der zufällig verteilten immobilen Spezies gestreut. Erweitert man die Hubbard-I Näherung [1] um die resultierende Streukorrektur, läßt sich mit Annahme der Zustandsdichte (2.9) folgende kubische Gleichung ableiten [10]

$$[G(\omega)]^3 - 2\omega[G(\omega)]^2 + G(\omega) \left(1 + \omega^2 - U/4\right) - \omega = 0, \quad (4.1)$$

aus welcher der exakte Ausdruck für die Einteilchen-Greenfunktion im Falicov-Kimball Modell folgt. Die Anwendung der Renormierten Störungsentwicklung [21] am Bethegitter stellt eine weitere Möglichkeit zur Herleitung der kubischen Gleichung dar [25].

Mit der Kenntnis von  $G(z)$  ist die Anzahl und die Position der Nullstellen des Imaginärteils und damit der Bandkanten in Abhängigkeit von  $U$  gegeben. Für  $U > 2$

existieren zwei Bänder mit der Breite  $W_1 = W_2 = W/\sqrt{2}$  und dem Abstand

$$\Delta(U) = 2 \left( \frac{2}{U^2} \left[ -\frac{1}{4} + \frac{5U^2}{4} + \frac{U^4}{8} - \sqrt{\frac{1}{16} + \frac{3U^2}{8} + \frac{3U^4}{4} + \frac{U^6}{2}} \right] \right)^{1/2}, \quad (4.2)$$

welcher bei der kritischen Wechselwirkung  $U_c = 2$ , die den Mott-Übergang kennzeichnet, verschwindet [25].

Entwickelt man den obigen Ausdruck in eine Potenzreihe in  $1/U$  ergibt sich bis einschließlich erster, zweiter und dritter Ordnung

$$\Delta_1(U) = U - 2\sqrt{2} + \frac{1}{U}, \quad (4.3)$$

$$\Delta_2(U) = U - 2\sqrt{2} + \frac{1}{U} + \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{1}{U^2}, \quad (4.4)$$

$$\Delta_3(U) = U - 2\sqrt{2} + \frac{1}{U} + \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{1}{U^2} + \frac{1}{2} \frac{1}{U^3}. \quad (4.5)$$

Alle weiteren Korrekturen sind ebenfalls positiv. Wird die Wechselwirkung an den kritischen Wert herangeführt,  $U \rightarrow U_c^+$ , wächst die Lücke: Die Hubbard-Bänder “stoßen sich ab”.

Aus (3.36), (4.3) und (4.4) können approximative Werte  $U_c^{(n)}$  für die kritische Wechselwirkung mit  $\Delta_n(U_c^{(n)}) = 0$  berechnet werden

$$U_c^{(0)} = 2.83, \quad U_c^{(1)} = 2.41, \quad U_c^{(2)} = 2.24, \quad U_c^{(3)} = 2.16, \quad \dots, \quad U_c = 2. \quad (4.6)$$

Bereits  $U_c^{(2)}$  weicht nur um etwa 12 Prozent,  $U_c^{(3)}$  um 8 Prozent vom exakten Wert ab. Die Entwicklung konvergiert somit recht schnell und die Kenntnis der ersten Ordnungen gestattet Vorhersagen über die kritischen Werte am Mott-Hubbard Übergang.

In Abbildung 4.1 ist der genäherte Ausdruck für die Lücke einschließlich der Korrektur zweiter Ordnung (4.4) gegen das exakte Ergebnis (4.2) aufgetragen. Ab etwa  $U = 3 = 1.5U_c$  ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung der Entwicklung mit den exakten Werten.

Setzt man  $z = \omega + U/2$  in (4.1) ein und betrachtet mit  $|z| = \mathcal{O}(1)$  das untere

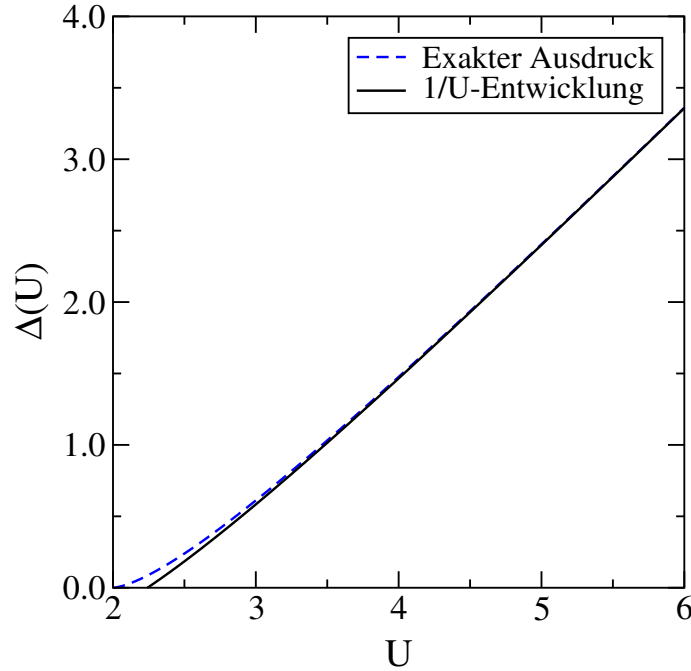


Abbildung 4.1: Mott-Hubbard Lücke für Ladungsanregungen im Falicov-Kimball Modell. Die gestrichelte Linie stellt den exakten Ausdruck dar, die durchgezogene Linie gibt die Entwicklung bis zur zweiten Ordnung wieder.

Hubbard-Band, gilt

$$[G(z)]^3 - 2z[G(z)]^2 + G(z)(1 + z^2) - z + U([G(z)]^2 - zG(z) + 1/2) = 0. \quad (4.7)$$

Für  $U \rightarrow \infty$  folgt mit  $[G(z)]^2 - zG(z) + 1/2 = 0$  daraus der Ausdruck niedrigster Ordnung als  $G_0(z)$ , (3.34).

Abbildung 4.2 zeigt die exakte, mit (4.1) ermittelte Zustandsdichte des unteren Hubbard-Bandes für  $U = 3 = 1.5U_c$  zusammen mit der sich aus  $G_0(z)$  ergebenden Zustandsdichte (2.10) bei unendlich starker Wechselwirkung. Die endliche Wech-

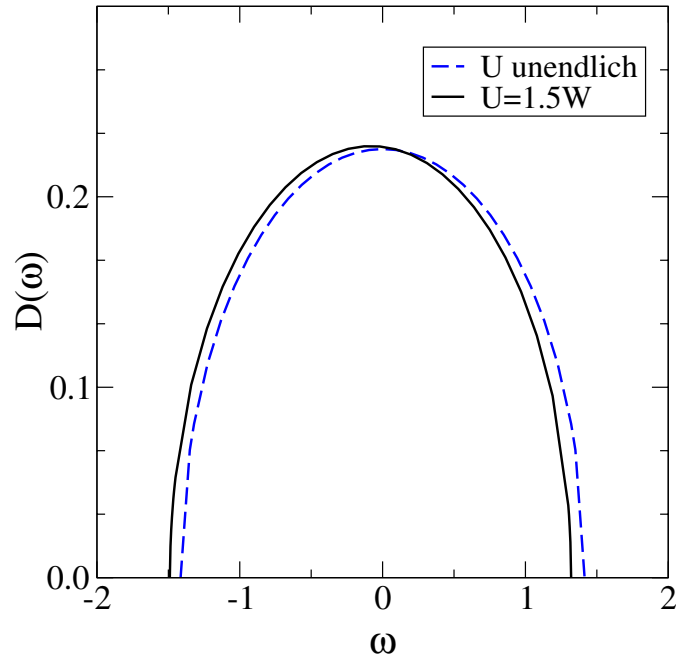


Abbildung 4.2: Zustandsdichte des unteren Hubbard-Bandes im Falicov-Kimball Modell. Gestrichelte Linie:  $U = \infty$ . Durchgezogene Linie:  $U = 1.5W$ .

selwirkung verursacht eine Verschiebung des Bandes auf der Energieachse nach unten.

## 4.2 Greenfunktion zur Ordnung $1/U$

Die Korrekturen höherer Ordnung zur Greenfunktion resultieren (i) aus der Entwicklung der Fermioperatoren und (ii) aus der Entwicklung des Hamiltonoperators. Terme, in welche die Entwicklung der Fermioperatoren eingeht, modifizieren nur die Form der Zustandsdichte und werden im folgenden als *formverändernde Anteile* bezeichnet. Die ausschließlich aus der Entwicklung des Hamiltonoperators entstehenden Ausdrücke führen zur Renormierung der Lücke. Die Immobilität einer Elektronenspezies führt zur wesentlichen Vereinfachung bei der Ermittlung der Korrekturen. Daher wird ihre Berechnung im Falicov-Kimball Modell ausführlicher

dargestellt.

#### 4.2.1 Formverändernde Anteile

Die zu (3.21) beitragenden, Ausdrücke der Entwicklung (3.22) enthaltenden Terme erster Ordnung lauten

$$G_{1,\alpha}(z) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{T} \hat{S}^1 \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger \hat{P}_0 [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle + \text{H.c.} \quad (4.8)$$

Darin fordert der Operator  $\hat{c}_{\mathbf{j}}$  zunächst die Besetzung des Gitterplatzes  $\mathbf{j}$  mit einem mobilen Elektron. Der Operator  $\hat{S}^1 \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger$  mit  $\hat{S}^1 = \sum_{n=1}^{\infty} [-\hat{P}_n/nU]$  dagegen verlangt nach Anwendung des Ausdrucks  $[z + \hat{h}_0]^{-1}$ , welcher einfaches Nächstnachbarhüpfen des Loches erzeugt, das Vorhandensein eines immobilen Elektrons auf Platz  $\mathbf{j}$ . Damit wäre Mobilität des immobilen Elektrons vorausgesetzt, welche nach Definition nicht gegeben ist.

Die formverändernden Anteile bis einschließlich erster Ordnung verschwinden daher im Falicov-Kimball Modell.

#### 4.2.2 Renormierungsproblem

Die Korrekturen erster Ordnung resultieren nur aus der Entwicklung des Hamiltonoperators

$$\begin{aligned} G_1(z) &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger [z + \hat{h}_0 + \hat{h}_1]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle \\ &= G_0(z) + \tilde{G}_1(z) + \mathcal{O}(U^{-2}), \end{aligned} \quad (4.9)$$

mit

$$\tilde{G}_1(z) = -\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{h}_1 [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle. \quad (4.10)$$

Der Operator  $\hat{h}_1$  (3.24) kann als Summe der Anteile

$$\hat{h}_1^{2s} = -\hat{P}_0 \left( \frac{1}{ZU} \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{l} \rangle} \hat{c}_{\mathbf{i}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{l}} \hat{f}_{\mathbf{l}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{l}} \hat{c}_{\mathbf{l}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}} + E_0^{(1)} \right) \hat{P}_0 \quad (4.11)$$

und

$$\hat{h}_1^{3s} = -\frac{1}{ZU} \hat{P}_0 \sum_{\substack{(\mathbf{i}, \mathbf{l}), (\mathbf{l}, \mathbf{k}) \\ \mathbf{i} \neq \mathbf{k}}} \left(1 - \hat{f}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}}\right) \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{l}} \hat{f}_{\mathbf{l}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{i}} \hat{c}_{\mathbf{i}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}} \hat{P}_0 \quad (4.12)$$

ausgedrückt werden, wobei  $E_0^{(1)}$  den Beitrag erster Ordnung zur Grundzustandsenergie für halbe Bandfüllung im Falicov-Kimball Modell darstellt. Bei Abwesenheit von Löchern ist die Wirkung des Operators  $\hat{h}_1^{3s}$  blockiert und es gilt

$$E_0^{(1)} = \langle \hat{h}_1 \rangle = -\frac{1}{ZU} \left\langle \sum_{(\mathbf{i}, \mathbf{l})} \hat{c}_{\mathbf{i}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{l}} \hat{f}_{\mathbf{l}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{i}} \hat{c}_{\mathbf{i}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}} \right\rangle. \quad (4.13)$$

Die Prozesse, welche in obige Gleichung eingehen, beschreiben das Hüpfen eines mobilen Elektrons vom Gitterplatz  $\mathbf{i}$ , der mit der Wahrscheinlichkeit  $p_{\mathbf{i}} = \langle \hat{c}_{\mathbf{i}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}} \rangle = 1/2$  von einem solchen besetzt wird, auf einen der  $Z$  Nachbarplätze  $\mathbf{l}$  und zurück, wobei  $\mathbf{l}$  mit einem immobilen Elektron besetzt sein muß (Wahrscheinlichkeit  $p_{\mathbf{l}} = 1/2$ ). Damit folgt

$$E_0^{(1)} = -\frac{1}{U} L p_{\mathbf{l}} p_{\mathbf{i}} = -\frac{L}{4U}. \quad (4.14)$$

Da bei Anwesenheit eines Loches der oben beschriebene Prozeß bei  $Z$  Paaren genau  $2Z$  mal nicht stattfinden kann, liefert der Zweiplatzterm  $\hat{h}_1^{2s}$  den Beitrag

$$\begin{aligned} & \frac{1}{LZU} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger \left[ z + \hat{h}_0 \right]^{-1} \hat{P}_0 \sum_{(\mathbf{i}, \mathbf{l})} \left( \hat{c}_{\mathbf{i}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{l}} \hat{f}_{\mathbf{l}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{i}} \hat{c}_{\mathbf{i}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}} - \frac{1}{4} \right) \hat{P}_0 \left[ z + \hat{h}_0 \right]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle \\ &= -\frac{1}{2U} \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger \left[ z + \hat{h}_0 \right]^{-2} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle \end{aligned} \quad (4.15)$$

zum Korrekturterm (4.10).

Der den Dreiplatzterm  $\hat{h}_1^{3s}$  enthaltende Anteil von (4.10) verschwindet dagegen: Der Operator  $\hat{h}_1^{3s}$  verschiebt das Loch vom Gitterplatz  $\mathbf{k}$  über das immobile Elektron bei  $\mathbf{l}$  hinweg zum Platz  $\mathbf{i}$ . Von dort aus kann es seinen Ausgangsort mit dem durch  $[z + \hat{h}_0]^{-1}$  generierten Nächstnachbarhüpfen aufgrund des immobilen Elektrons bei  $\mathbf{l}$  nicht erreichen.

Insgesamt erhält man mit (3.34) und (4.15)

$$\begin{aligned} \tilde{G}_1(z) &= \frac{1}{2U} \frac{\partial}{\partial z} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger \left[ z + \hat{h}_0 \right]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle \\ &= \frac{1}{4U} \left[ 1 + \frac{z}{\sqrt{z^2 - 2}} \right] \end{aligned} \quad (4.16)$$

in Übereinstimmung mit dem exakten Term erster Ordnung in  $1/U$  der Greenfunktion, welcher die aus Gleichung (4.1) abgeleitete Beziehung

$$[G_0(z)]^3 - 2z[G_0(z)]^2 + G_0(z)(1 + z^2) + \tilde{G}_1(z)(2G_0(z) - z) - z = 0 \quad (4.17)$$

erfüllt, vergleiche (4.7).

Der Ausdruck (4.16) ist aufgrund der Renormierung bis  $1/U$  erwartungsgemäß divergent in  $\omega = -U/2 + \sqrt{2} = [\mu_{\text{UHB}}]_0^+$ , wo die Zustandsdichte in niedrigster Ordnung (3.35) verschwindet. Aus der gewöhnlichen Störungstheorie ist bekannt, daß Korrekturen endlicher Ordnung zur Greenfunktion keine Verschiebung von Einteilchenresonanzen bewirken. Vielmehr ist die Aufsummierung unendlicher Reihen, z.B. über die Dyson-Gleichung [22], erforderlich. Im vorliegenden Fall entarteter Störungstheorie existiert kein Standardverfahren zur Durchführung der Resummierung.

### 4.2.3 Lösung des Renormierungsproblems: Effektives Lochhüpfen

Die Bewegung des Loches auf dem Gitter ändert die Positionen der immobilen Elektronen nicht, zudem besitzt der Spinhintergrund keine Eigendynamik. In niedrigster Ordnung wird die Lochbewegung durch  $\hat{h}_0$  generiert. Operatoranteile höherer Ordnungen in  $1/U$  der Entwicklung (3.23) bewirken Modifikationen der Lochdynamik, indem sie zwischendurch auftretende Doppelbesetzungen durch virtuelle Hüpfprozesse erzeugen. Effektiv erfolgt dadurch eine Lochbewegung, die mit aus  $\hat{h}_0$  aufgebauten Polynomen realisiert werden kann.

Innerhalb der betrachteten Ordnung wird der Zustand des Loches durch  $\hat{h}_1$  nicht verändert. Mit der Ersetzung

$$\hat{h}_1 \rightarrow \hat{h}_1^{\text{eff}} = \frac{1}{2U} \quad (4.18)$$

in (4.10) gelangt man daher zu (4.16) und es folgt in (4.9)

$$G_1(z) = G_0(z + 1/(2U)) . \quad (4.19)$$

Die Korrektur erster Ordnung resultiert in einer Energieverschiebung um  $1/(2U)$ .

#### 4.2.4 Zustandsdichte zur Ordnung $1/U$

Die mit (4.19) berechnete Zustandsdichte lautet

$$D_1(\omega) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{2 - \left( \omega + \frac{U}{2} + \frac{1}{2U} \right)^2}, \quad \left| \omega + \frac{U}{2} + \frac{1}{2U} \right| \leq \sqrt{2}. \quad (4.20)$$

Die Lücke ergibt sich mit  $[\mu_{\text{UHB}}]_1^+ = -U/2 + \sqrt{2} - 1/(2U)$  bis einschließlich erster Ordnung in  $1/U$  zu

$$\Delta_1(U) = U - 2\sqrt{2} + \frac{1}{U} \quad (4.21)$$

in Übereinstimmung mit dem exakten Ergebnis (4.3).

### 4.3 Greenfunktion zur Ordnung $1/U^2$

#### 4.3.1 Formverändernde Anteile

Die in (3.21) auftretenden Terme zweiter Ordnung in  $1/U$ , in welche die Entwicklung der Fermioperatoren eingeht, lauten

$$G_{2,\alpha}(z) = -\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{T} \hat{S}^1 \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger \hat{P}_0 [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{h}_1 [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle + \text{H.c.}, \quad (4.22)$$

$$G_{2,\beta}(z) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger \hat{P}_0 [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{P}_0 \hat{c}_{\mathbf{j}} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \right\rangle + \text{H.c.}, \quad (4.23)$$

$$G_{2,\gamma}(z) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger \hat{P}_0 [z + \hat{h}_0]^{-1} \left[ \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{c}_{\mathbf{j}} \hat{S}^1 \hat{T} - \frac{1}{2} \hat{P}_0 \hat{c}_{\mathbf{j}} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{P}_0 - \frac{1}{2} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{P}_0 \hat{c}_{\mathbf{j}} \hat{P}_0 \right] \right\rangle + \text{H.c.}, \quad (4.24)$$

$$G_{2,\delta}(z) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{T} \hat{S}^1 \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger \hat{P}_0 [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{P}_0 \hat{c}_{\mathbf{j}} \hat{S}^1 \hat{T} \right\rangle. \quad (4.25)$$

Der Term  $G_{2,\alpha}(z)$  liefert keinen Beitrag: Wie im Ausdruck (4.8) der Ordnung  $1/U$  fordert der Operator  $\hat{c}_{\mathbf{j}}$  zunächst die Präsenz eines mobilen Elektrons auf Gitterplatz  $\mathbf{j}$ , der Operator  $\hat{T} \hat{S}^1 \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger$  verlangt nach Anwendung von  $[z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{h}_1 [z + \hat{h}_0]^{-1}$  die Anwesenheit des Loches auf einem der Nachbarplätze von  $\mathbf{j}$ , welcher zuvor von



einem immobilen Elektron besetzt wurde. Damit wäre jedoch die nicht vorhandene Beweglichkeit der immobilen Elektronen vorausgesetzt.

Im Ausdruck  $G_{2,\beta}(z)$  generiert der Operator  $\hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T}$  durch den Hüpfprozeß eines mobilen Elektrons zum Gitterplatz  $\mathbf{j}$ , welcher bereits ein immobiles Elektron enthält, ein Loch auf einem seiner übernächsten Nachbarplätze. Nach Auflösung der Doppelbesetzung setzt der Operator  $\hat{c}_j^\dagger$  schließlich eine mit  $[z + \hat{h}_0]^{-1}$  erzeugte Bewegung des Lochs über die mit immobilen Elektronen besetzten Plätze zu  $\mathbf{j}$  voraus. Daher verschwindet dieser Term ebenfalls.

Die in  $G_{2,\gamma}(z)$  auftretenden Operatoren bestehen aus folgenden Anteilen

$$\begin{aligned} \hat{P}_0 \hat{c}_j \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{P}_0 &= \frac{1}{ZU^2} \left[ \sum_{\langle \mathbf{k}, \mathbf{l} \rangle} \hat{c}_j \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_l \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} + \sum_{\langle \mathbf{j}, \mathbf{k} \rangle} \hat{c}_j \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_j \right] \\ &= ia + ib, \end{aligned} \quad (4.26)$$

$$\begin{aligned} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{c}_j \hat{P}_0 &= \frac{1}{ZU^2} \left[ \sum_{\langle \mathbf{k}, \mathbf{l} \rangle} \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_l (\hat{f}_l^\dagger \hat{f}_l) \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} \hat{c}_j + \sum_{\langle \mathbf{j}, \mathbf{k} \rangle} \sum_{\substack{\langle \mathbf{k}, \mathbf{l} \rangle \\ l \neq j}} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} (\hat{f}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}}) \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_l \hat{c}_j \right] \\ &= iia + iib, \end{aligned} \quad (4.27)$$

$$\begin{aligned} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{c}_j \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0 &= \frac{1}{ZU^2} \left[ \sum_{\langle \mathbf{k}, \mathbf{l} \rangle} \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_l \hat{c}_j (1 - \hat{f}_j^\dagger \hat{f}_j) \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\langle \mathbf{j}, \mathbf{k} \rangle} \sum_{\substack{\langle \mathbf{k}, \mathbf{l} \rangle \\ l \neq j}} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} \hat{c}_j (1 - \hat{f}_j^\dagger \hat{f}_j) \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_l \right] \\ &= iii a + iii b, \end{aligned} \quad (4.28)$$

wobei  $\langle \mathbf{k}, \mathbf{l} \rangle$  ein beliebiges Paar nächster Nachbarn und  $\langle \mathbf{j}, \mathbf{k} \rangle$  ein den Gitterplatz  $\mathbf{j}$  enthaltendes Paar bedeutet, an welchem in (4.22) bis (4.25) ein mobiles Elektron vernichtet wird. Die aus  $ia - iia$  resultierenden Prozesse sind in Abbildung 4.3 dargestellt. Da sie sich nur in der Reihenfolge der Teilschritte unterscheiden, heben sich ihre Beiträge in (4.24) gerade weg.

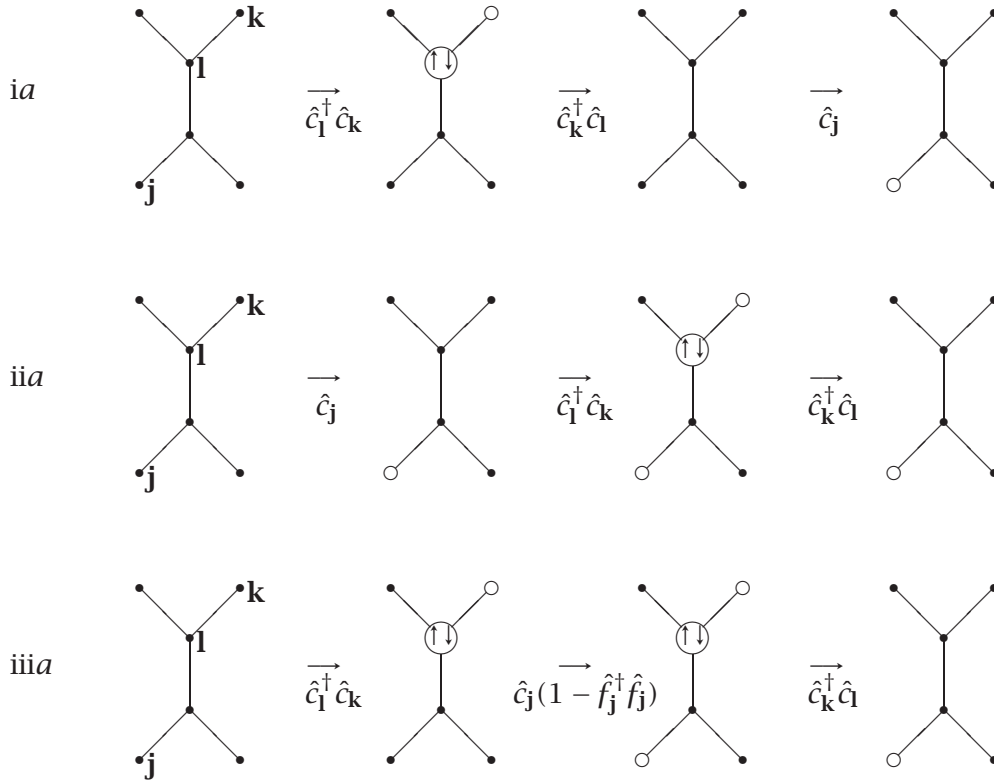


Abbildung 4.3: Aus ia-iiia resultierende Prozesse am Bethegitter mit drei nächsten Nachbarn. Dabei bedeuten • einen einfach besetzten, ◦ einen unbesetzten Gitterplatz.

Die Anteile iib und iiib verschwinden ebenfalls: Sie generieren eine Lochbewegung vom Gitterplatz  $j$  über das immobile Elektron des Nachbarplatzes hinweg, welches durch einfaches Nächstnachbarhüpfen nicht überwunden werden kann, zum Platz  $l$ . Damit kann das Loch seinen Ausgangszustand nicht mehr annehmen.

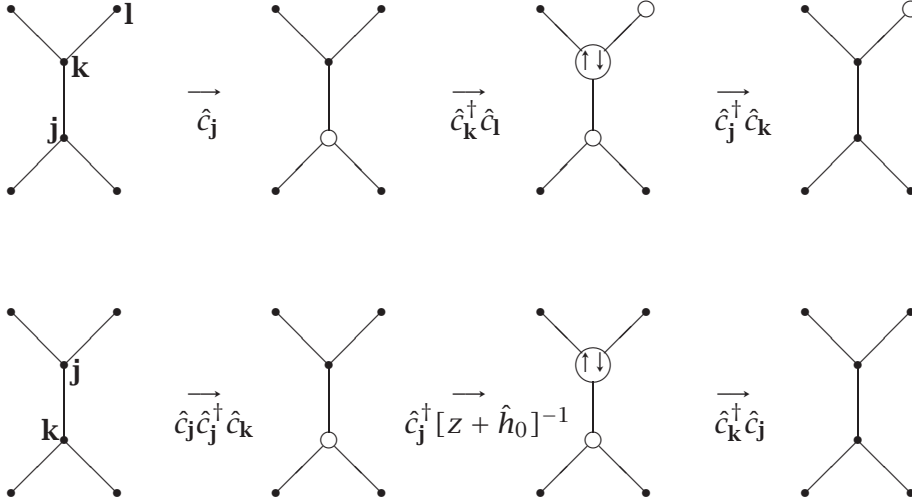


Abbildung 4.4: Obere Reihe: Aus  $ib$  resultierender Prozeß. Untere Reihe: In  $G_{2,\delta}(z)$  stattfindender Prozeß. Auch hier stellen  $\bullet$  einen einfach besetzten,  $\circ$  einen unbesetzten Gitterplatz dar.

Schließlich trägt nur  $ib$  zu  $G_{2,\gamma}(z)$  bei,

$$\begin{aligned}
 G_{2,\gamma}(z) &= -\frac{1}{2L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger \hat{P}_0 [z + \hat{h}_0]^{-1} \frac{1}{ZU^2} \sum_{\langle \mathbf{j}, \mathbf{k} \rangle} \hat{c}_{\mathbf{j}} \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} (\hat{f}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}}) \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle + \text{H.c.} \\
 &= -\frac{1}{2U^2L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger \hat{P}_0 [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle \langle \hat{f}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}} \rangle + \text{H.c.}
 \end{aligned} \tag{4.29}$$

Mit (3.34) und der Besetzungswahrscheinlichkeit  $p_{\mathbf{k}} = 1/2$  des Gitterplatzes  $\mathbf{k}$  mit einem immobilen Elektron folgt

$$G_{2,\gamma}(z) = -\frac{1}{U^2} \frac{1}{4} \left( z \pm \sqrt{z^2 - 2} \right). \tag{4.30}$$

Prozeß  $ib$  ist in Abbildung 4.4 dargestellt.

Der Term  $G_{2,\delta}(z)$  kann ausgedrückt werden durch

$$G_{2,\delta}(z) = \frac{1}{U^2L} \left\langle \frac{1}{Z} \sum_{\langle \mathbf{j}, \mathbf{k} \rangle} \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{j}} (1 - \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}}) \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}} (\hat{f}_{\mathbf{j}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{j}}) \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} \right\rangle. \tag{4.31}$$

Darin bedeutet  $\langle \mathbf{j}, \mathbf{k} \rangle$  wieder ein den Gitterplatz  $\mathbf{j}$  enthaltendes Paar nächster Nachbarn. Abbildung 4.4 zeigt den im obigen Ausdruck generierten Prozeß.

Insgesamt gilt mit (3.34) und  $p_{\mathbf{j}} = \langle \hat{f}_{\mathbf{j}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{j}} \rangle = 1/2$

$$\begin{aligned} G_{2,\delta}(z) &= \frac{1}{U^2 L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \frac{1}{Z} \sum_{\langle \mathbf{j}, \mathbf{k} \rangle} \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{k}} \right\rangle \frac{1}{2} \\ &= \frac{1}{U^2} \frac{1}{4} (z \pm \sqrt{z^2 - 2}) . \end{aligned} \quad (4.32)$$

Da  $G_{2,\gamma}(z)$  und  $G_{2,\delta}(z)$  bis auf ihr Vorzeichen gleich sind und sich daher herauskürzen, die übrigen Terme der formverändernden Anteile aber verschwinden, wird die Form der Zustandsdichte im Falicov-Kimball Modell auch in der zweiten Ordnung in  $1/U$  nicht modifiziert.

#### 4.3.2 Effektiver Operator der Lochbewegung

Einschließlich zweiter Ordnung in  $1/U$  lautet der nur durch die Störungsentwicklung des Hamiltonoperators (3.23) beitragende Term zur Greenfunktion (3.21)

$$\begin{aligned} G_2(z) &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger [z + \hat{h}_0 + \hat{h}_1 + \hat{h}_2]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle \\ &= G_0(z) + \tilde{G}_1(z) + \tilde{G}_2(z) + \mathcal{O}(U^{-3}) , \end{aligned} \quad (4.33)$$

mit

$$\begin{aligned} \tilde{G}_2(z) &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-1} \left( (\hat{h}_1^{2s} + \hat{h}_1^{3s}) [z + \hat{h}_0]^{-1} (\hat{h}_1^{2s} + \hat{h}_1^{3s}) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \hat{h}_2 \right) [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle . \end{aligned} \quad (4.34)$$

Die Ersetzung  $z = \omega + U/2 - i\eta$  erfolgt am Ende der Rechnung.

Für den durch den Zweiplatzanteil  $\hat{h}_1^{2s}$  (4.11) erzeugten Term in  $\tilde{G}_2(z)$

$$\begin{aligned} \tilde{G}_2(z) \hat{h}_1^{2s} \hat{h}_1^{2s} &= \frac{1}{U^2 Z L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger \hat{P}_0 \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{l} \rangle} \left( \hat{c}_{\mathbf{i}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{l}} (\hat{f}_1^\dagger \hat{f}_1) \hat{c}_{\mathbf{l}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}} - \frac{1}{4} \right) [z + \hat{h}_0]^{-1} \right. \\ &\quad \left. \hat{P}_0 \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{l} \rangle} \left( \hat{c}_{\mathbf{i}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{l}} (\hat{f}_1^\dagger \hat{f}_1) \hat{c}_{\mathbf{l}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}} - \frac{1}{4} \right) [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle \end{aligned} \quad (4.35)$$

ergibt sich mit der in Abschnitt 4.2 begründeten Beziehung  $\langle \hat{c}_j^\dagger \hat{h}_1^{2s} \hat{c}_j \rangle = -1/(2U)$

$$\tilde{G}_2(z) \hat{h}_1^{2s} \hat{h}_1^{2s} = \frac{1}{4U^2} \frac{1}{L} \sum_j \left\langle \hat{c}_j^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-3} \hat{c}_j \right\rangle, \quad (4.36)$$

da der Operator  $\hat{h}_1^{2s}$  keine Lochbewegung erzeugt.

Im ausschließlichen die Dreiplatzanteile  $\hat{h}_1^{3s}$  des Operators  $\hat{h}_1$  enthaltenden Beitrag zu  $\tilde{G}_2(z)$

$$\tilde{G}_2(z) \hat{h}_1^{3s} \hat{h}_1^{3s} = \frac{1}{L} \sum_j \left\langle \hat{c}_j^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{h}_1^{3s} [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{h}_1^{3s} [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_j \right\rangle \quad (4.37)$$

wird das zunächst in  $j$  erzeugte Loch durch einfaches Nächstnachbarhüpfen zum beliebigen,  $m$  Schritte entfernten Gitterplatz  $k$  verschoben. Die Gesamtheit der von  $j$  zu sämtlichen Gitterpunkten führenden Pfade auf dem Bethegitter, welche in (4.37) eingeht, lautet im Limes  $Z \rightarrow \infty$

$$\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{(2Z)^m} [2ZG_0(z)]^{m+1} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{(2Z)^m} \left[ z \left( z - \sqrt{z^2 - 2} \right) \right]^{m+1}, \quad (4.38)$$

da jeder Schritt auf dem einfachsten Weg von  $j$  zu  $k$  mit der Wahrscheinlichkeit  $1/2$  erfolgt und jeder der  $m+1$  besuchten Gitterplätze mit der Menge aller Pfade, die am selben Platz beginnen und enden,  $2ZG_0(z)$ , dekoriert werden kann.

Der darauffolgende Operator  $\hat{h}_1^{3s}$  verschiebt das Loch mit der Wahrscheinlichkeit  $1/4$  vom Gitterplatz  $k$  zum übernächsten Nachbarplatz über ein immobiles Elektron hinweg. Dieser Prozeß muß durch den zweiten Dreiplatzoperator umgekehrt werden, da das immobile Elektron durch einfaches Nächstnachbarhüpfen des Loches zum Ausgangsort  $j$  nicht überwunden werden kann. Schließlich werden alle von  $k$  zu  $j$  führenden Pfade aufsummiert. Damit folgt

$$\begin{aligned} \tilde{G}_2(z) \hat{h}_1^{3s} \hat{h}_1^{3s} &= \frac{1}{2U^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{2^m} \frac{1}{z^{2m}} [2ZG_0(z)]^{2(m+1)} 2G_0(z) \frac{1}{4} \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{U^2} \frac{1}{L} \sum_j \left\langle \hat{c}_j^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-2} \hat{c}_j \right\rangle G_0(z). \end{aligned} \quad (4.39)$$

Die gemischten Terme  $\tilde{G}_2(z) \hat{h}_1^{2s} \hat{h}_1^{3s}$  und  $\tilde{G}_2(z) \hat{h}_1^{3s} \hat{h}_1^{2s}$  verschwinden, was analog zur Argumentation in Abschnitt 4.2 begründet werden kann.

Für den  $\hat{h}_2$  enthaltenden Term in  $\tilde{G}_2(z)$  gilt mit (3.24)

$$\begin{aligned}
 \tilde{G}_2(z)^{\hat{h}_2} &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{h}_2 [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle \\
 &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-1} \left( \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0 \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - \frac{1}{2} \left( \hat{h}_0 (\hat{h}_1^{2s} + E_0^{(1)} + \hat{h}_1^{3s}) + (\hat{h}_1^{2s} + E_0^{(1)} + \hat{h}_1^{3s}) \hat{h}_0 \right) \right) \right. \\
 &\quad \left. [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle .
 \end{aligned} \tag{4.40}$$

Die  $\hat{h}_1^{3s}$ -Anteile liefern wieder keinen Beitrag.

Bei Anwesenheit eines Loches ist

$$\begin{aligned}
 U^2 Z^{3/2} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0 &= \sum_{\langle \mathbf{k}, \mathbf{l} \rangle} \hat{c}_{\mathbf{l}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} \sum_{\substack{\langle \mathbf{m}, \mathbf{n} \rangle \\ \mathbf{m} \neq \mathbf{l}, \mathbf{n} \neq \mathbf{k}}} (1 - \hat{f}_{\mathbf{m}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{m}}) \hat{c}_{\mathbf{m}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{n}} (\hat{f}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}}) \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{l}} \\
 &+ \sum_{\langle \mathbf{k}, \mathbf{l} \rangle} \sum_{\langle \mathbf{m}, \mathbf{k} \rangle} (1 - \hat{f}_{\mathbf{m}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{m}}) \hat{c}_{\mathbf{m}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} \sum_{\substack{\langle \mathbf{l}, \mathbf{n} \rangle \\ \mathbf{n} \neq \mathbf{k}}} \hat{c}_{\mathbf{l}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{n}} (\hat{f}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}}) \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{l}} \\
 &+ \sum_{\langle \mathbf{k}, \mathbf{l} \rangle} \sum_{\langle \mathbf{m}, \mathbf{n} \rangle} (1 - \hat{f}_{\mathbf{m}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{m}}) \hat{c}_{\mathbf{m}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{n}} \sum_{\substack{\langle \mathbf{k}, \mathbf{n} \rangle \\ \mathbf{n} \neq \mathbf{l}}} (\hat{f}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{n}}) \hat{c}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} (\hat{f}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}}) \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{l}} \\
 &+ \sum_{\langle \mathbf{k}, \mathbf{l} \rangle} \sum_{\substack{\langle \mathbf{k}, \mathbf{n} \rangle \\ \mathbf{n} \neq \mathbf{l}}} \sum_{\langle \mathbf{m}, \mathbf{n} \rangle} \hat{c}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} (1 - \hat{f}_{\mathbf{m}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{m}}) \hat{c}_{\mathbf{m}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{n}} (\hat{f}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}}) \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{l}} \\
 &= ia + ib + ic + id
 \end{aligned} \tag{4.41}$$

Die Terme mit  $ib$ ,  $ic$  und  $id$  tragen wegen der Unüberwindbarkeit von immobilen Elektronen durch die einfache Lochbewegung nicht zum Ausdruck (4.40) bei.

Aufgrund von

$$\hat{h}_0 (\hat{h}_1^{2s} + E_0^{(1)}) = \frac{1}{U^2 Z} \sum_{\langle \mathbf{k}, \mathbf{l} \rangle} \left[ \sum_{\langle \mathbf{m}, \mathbf{n} \rangle} (1 - \hat{f}_{\mathbf{m}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{m}}) \hat{c}_{\mathbf{m}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{n}} \right] \hat{c}_{\mathbf{l}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} (\hat{f}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}}) \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{l}} \tag{4.42}$$

und

$$\left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{h}_0 \hat{h}_1^{2s} [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle = \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{h}_1^{2s} \hat{h}_0 [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle \tag{4.43}$$

ist

$$\begin{aligned}\tilde{G}_2(z)^{\hat{h}_2} &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-1} \left( \frac{i(a)}{U^2 Z^{3/2}} - \hat{h}_0 (\hat{h}_1^{2s} + E_0^{(1)}) \right) [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle \\ &= -\frac{1}{Z^{3/2} U^2 L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-1} \sum_{\langle \mathbf{m}, \mathbf{l} \rangle, \langle \mathbf{l}, \mathbf{k} \rangle} (1 - \hat{f}_{\mathbf{m}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{m}}) \hat{c}_{\mathbf{m}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{l}} \right. \\ &\quad \left. \hat{c}_{\mathbf{l}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} (\hat{f}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}}) \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{l}} [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle .\end{aligned}\quad (4.44)$$

In obiger Gleichung ist  $\mathbf{l}$  nächster Nachbar,  $\mathbf{k}$  ist übernächster Nachbar des Loches bei  $\mathbf{m}$ , welches sich durch den Operator  $(1 - \hat{f}_{\mathbf{m}}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{m}}) \hat{c}_{\mathbf{m}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{l}}$  (i) einen Schritt an seinen Ausgangsort  $\mathbf{j}$  annähern oder (ii) einen Schritt vom Ausgangsort  $\mathbf{j}$  entfernen kann. Beide Prozesse liefern den mit Hilfe von (4.38) berechneten Anteil

$$-\frac{1}{U^2} \frac{1}{4} (z \pm \sqrt{z^2 - 2}) \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-2} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle \quad (4.45)$$

zu  $\tilde{G}_2(z)^{\hat{h}_2}$ , so daß

$$\tilde{G}_2(z)^{\hat{h}_2} = -\frac{1}{U^2} G_0(z) \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-2} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle . \quad (4.46)$$

Insgesamt folgt mit (4.36), (4.39) und (4.46)

$$\begin{aligned}U^2 \tilde{G}_2(z) &= \frac{1}{4} \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-3} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle + \frac{G_0(z)}{2} \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-2} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle \\ &\quad - G_0(z) \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-2} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle .\end{aligned}\quad (4.47)$$

Aufgrund von

$$\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger \hat{h}_0 [z + \hat{h}_0]^{-2} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle = -2 G_0(z) \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-2} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle \quad (4.48)$$

kann  $\hat{h}_2$  in (4.33) durch den effektiven Operator  $\hat{h}_2^{\text{eff}}$  ersetzt werden mit

$$\hat{h}_2 \rightarrow \hat{h}_2^{\text{eff}} = -\frac{1}{4U^2} \hat{h}_0 , \quad (4.49)$$

und zusammen mit (4.18) ergibt sich bis einschließlich zweiter Ordnung in  $1/U$

$$G_2(z) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}}^\dagger \left[ z + \hat{h}_0 + \frac{1}{2U} - \frac{\hat{h}_0}{4U^2} \right]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}} \right\rangle \quad (4.50)$$

im Falicov-Kimball Modell.

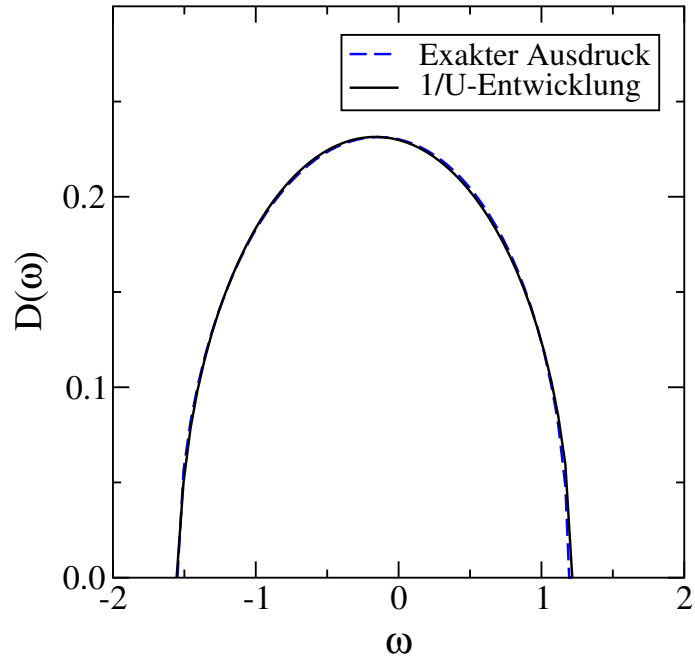


Abbildung 4.5: Zustandsdichte des unteren Hubbard-Bandes im Falicov-Kimball Modell bei  $U = 3 = 1.5U_c$ . Gestrichelte Linie: Exakte Werte. Durchgezogene Linie:  $1/U$ -Entwicklung einschließlich zweiter Ordnung.

### 4.3.3 Zustandsdichte

Mit der bekannten Zustandsdichte des Operators  $\hat{h}_0$  lässt sich die Zustandsdichte des unteren Hubbard-Bandes durch

$$\begin{aligned}
 D_2(\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \rho(\epsilon) \delta\left(\omega + \frac{U}{2} + \epsilon + \frac{1}{2U} - \frac{\epsilon}{4U^2}\right) \\
 &= \frac{1}{1 - 1/(4U^2)} \rho\left(\frac{\omega + \frac{U}{2} + \frac{1}{2U}}{1 - 1/(4U^2)}\right)
 \end{aligned} \tag{4.51}$$



ausdrücken und lautet explizit

$$D_2(\omega) = \frac{1}{2\pi} \left(1 - \frac{1}{4U^2}\right)^{-2} \sqrt{2 \left(1 - \frac{1}{4U^2}\right)^2 - \left(\omega + \frac{U}{2} + \frac{1}{2U}\right)^2}, \quad (4.52)$$

$$\left| \omega + \frac{U}{2} + \frac{1}{2U} \right| \leq \sqrt{2} - \frac{\sqrt{2}}{2U^2}.$$

Die Lücke bis einschließlich zweiter Ordnung ergibt sich mit  $[\mu_{\text{LHB}}^{\text{FK}}]_2^+ = -U/2 + \sqrt{2} - 1/(2U) - \sqrt{2}/(4U^2)$  zu

$$\Delta_2(U) = U - 2\sqrt{2} + \frac{1}{U} + \frac{\sqrt{2}}{2U^2} \quad (4.53)$$

in Übereinstimmung mit dem exakten Ergebnis (4.4). Die Zustandsdichte (4.52) einschließlich der Korrektur zweiter Ordnung in  $1/U$  ist zusammen mit dem aus (4.1) ermittelten Ausdruck in Abbildung 4.5 dargestellt. Auch hier ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung beider Kurven.

## 5 Hubbard Modell

Das vorangegangene Kapitel zeigt, daß die aus der Störungsentwicklung resultierenden Operatorsequenzen effektiv zu einer Lochbewegung führen und daher durch Polynome in  $\hat{h}_0$  ersetzt werden können. Hierzu ist die Berechnung der die Polynome bestimmenden Faktoren erforderlich, die von den Besetzungswahrscheinlichkeiten der Gitterplätze und den Spin-Spin-Korrelationen abhängen.

Die rasche Konvergenz der am Falicov-Kimball Modell geprüften Störungsentwicklung wird in diesem Kapitel genutzt, um die kritische Wechselwirkung am Mott-Übergang im Hubbard Modell zu bestimmen. Die folgenden Abschnitte enthalten die Berechnung der Zustandsdichte und ihrer Momente, der Energielücke und der Einteilchen-Selbstenergie bis einschließlich zweiter Ordnung. Der letzte Abschnitt beschäftigt sich mit der Ermittlung der Korrektur dritter Ordnung in  $1/U$  zur Energielücke. Zunächst jedoch sollen die Grundzustandseigenschaften des halbgefüllten Hubbard Modells vorgestellt werden.

### 5.1 Grundzustandseigenschaften

#### 5.1.1 Grundzustandsenergie bis zur Ordnung $U^{-3}$

Der bei halber Bandfüllung wirksame, aus der Störungsentwicklung des Hamiltonoperators (3.23) resultierende Anteil erster Ordnung in  $1/U$  lautet

$$\hat{h}_1^{\text{hB}} = \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0 = -\frac{1}{UZ} \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{|t_{ij}|^2}{2} \left( 1 - 4\hat{S}_i^z \hat{S}_j^z \right) . \quad (5.1)$$

Der paramagnetischen Phase des Hubbard Modells liegt in  $d = \infty$  Dimensionen folgende Korrelationsfunktion der kinetischen Energien der Impulse  $\mathbf{p}$  und  $\mathbf{p} + \mathbf{q}$

zugrunde [10]

$$D_{\mathbf{q}}(\epsilon_1, \epsilon_2) := \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{p}} \delta(\epsilon_1 - \epsilon(\mathbf{p} + \mathbf{q})) \delta(\epsilon_2 - \epsilon(\mathbf{p})) , \quad (5.2)$$

$$D_{\mathbf{q}}(\epsilon_1, \epsilon_2) = D_0(\epsilon_1) \delta(\epsilon_1 - \epsilon_2) \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{0}} + (1 - \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{0}}) D_0(\epsilon_1) D_0(\epsilon_2) \quad \text{für } d = \infty . \quad (5.3)$$

Einsetzen der Beziehungen

$$\hat{S}_{\mathbf{j}} = \sqrt{\frac{1}{L}} \sum_{\mathbf{p}} \hat{S}(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\mathbf{j}} , \quad t_{ij} = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{p}} \epsilon(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}(\mathbf{i}-\mathbf{j})} \quad (5.4)$$

und

$$J(\mathbf{q}) = \frac{2}{U} \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{p}} \epsilon(\mathbf{p}) \epsilon(\mathbf{p} + \mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon_1 \epsilon_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon_2 \epsilon_2 D_{\mathbf{q}}(\epsilon_1, \epsilon_2) \quad (5.5)$$

in den Operator (5.1) liefert

$$\hat{h}_1^{\text{hB}} = J \left( \hat{S} \hat{S} - \frac{L}{4} \right) . \quad (5.6)$$

Dabei ist  $J = J(\mathbf{0}) = 2/U$  und  $\hat{S} = \sqrt{1/L} \sum_{\mathbf{j}} \hat{S}_{\mathbf{j}}$ . Für  $\hat{S} = 0$  ist der Energieeigenwert minimal und es gilt in der ersten Ordnung in  $1/U$

$$E_0^{(1)} = -J \frac{L}{4} = -\frac{L}{2U} . \quad (5.7)$$

Damit stellt jedes globale Singulett einen Grundzustand des Mott-Hubbard Isolators in der ersten Ordnung in  $(1/U)$  dar. Die bei  $T = 0$  vorliegende Entartung wird also nicht aufgehoben.

Der Erwartungswert der Ausdrücke gerader Ordnung in  $1/U$ , (3.24), verschwindet: Bei Abwesenheit von Löchern liefern Operatoranteile, welche Sequenzen der Form  $\cdots \hat{P}_0 \hat{T} \hat{P}_0 \cdots$  enthalten, keinen Beitrag. Die Ausdrücke  $\hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^{k_1} \hat{T} \cdots \hat{T} \hat{S}^{k_{n+1}} \hat{T} \hat{P}_0$  führen bei ungeradem  $n$  und halber Bandfüllung nicht zu geschlossenen Graphen auf dem Bethegitter [24].

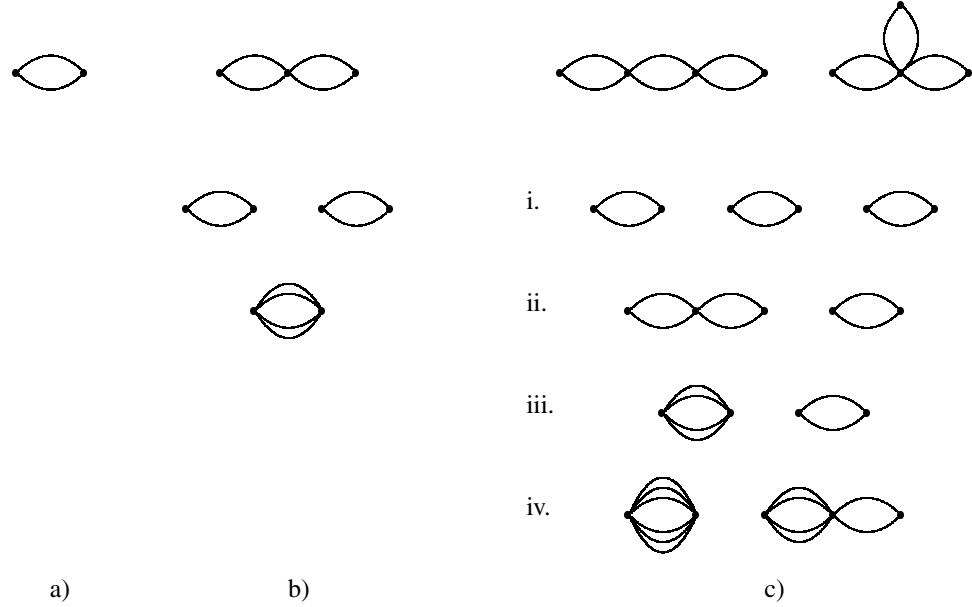


Abbildung 5.1: Graphen für die Berechnung der Grundzustandsenergie. Unter a): innerhalb der ersten Ordnung in  $1/U$ , b): innerhalb der dritten Ordnung, c): innerhalb der fünften Ordnung generierte Graphen. Die Punkte stellen benachbarte Gitterplätze dar, die Linien repräsentieren Hüpfpunkte der Teilchen.

Der bei halber Bandfüllung wirksame Anteil dritter Ordnung in  $1/U$  der Entwicklung ist daher

$$\hat{h}_3^{\text{hB}} = \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0 - \frac{1}{2} \left( \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{P}_0 + \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0 \right) \quad (5.8)$$

$$= -\frac{1}{U^3} \left( \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle} (1 - 4\hat{S}_{\mathbf{i}}^z \hat{S}_{\mathbf{j}}^z) - \frac{1}{2} \sum_{\substack{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle \langle \mathbf{j}, \mathbf{k} \rangle \\ \mathbf{i} \neq \mathbf{k}}} |t_{\mathbf{ij}}|^2 |t_{\mathbf{jk}}|^2 (1 - 4\hat{S}_{\mathbf{i}}^z \hat{S}_{\mathbf{j}}^z) (1 - 4\hat{S}_{\mathbf{j}}^z \hat{S}_{\mathbf{k}}^z) \right). \quad (5.9)$$

Werden die Beziehungen (5.5) in die obige Gleichung eingesetzt und die Korrelati-

onsfunktion (5.3) verwendet, folgt

$$\hat{h}_3^{\text{hB}} = \frac{J^2}{U} \left( 2 \sum_{\mathbf{p}} \left( \hat{S}(\mathbf{p}) \hat{S} \right)^2 - \frac{L}{8} \right). \quad (5.10)$$

Der minimale Erwartungswert des obigen Ausdrucks ergibt sich wieder für  $\hat{S} = 0$ . Die Entartung ist auch durch die dritte Ordnung in  $1/U$  nicht aufgehoben. Der Beitrag zur Grundzustandsenergie lautet somit

$$E_0^{(3)} = -\frac{L}{2U^3}. \quad (5.11)$$

Die durch die Operatoren generierten Hüpfprozesse der Teilchen auf dem Gitter können durch Graphen dargestellt werden. Abbildung 5.1 zeigt die in der ersten, der dritten und der fünften Ordnung in  $1/U$  auftretenden Graphen. Unverbundene Graphen kürzen sich heraus. Graphen, bei welchen zwei Gitterplätze durch mehr als zwei Hüpfprozesse (Linien) miteinander verbunden sind, besitzen verschwindendes statistisches Gewicht im Limes  $Z \rightarrow \infty$  und liefern ebenfalls keinen Beitrag.

Mit Annahme des Verschwindens aller unverbundenen Graphen auf dem  $A$ - $B$  Gitter und der Hermitezität des Hamiltonoperators lassen sich die Anteile hoher Ordnung in  $1/U$  der Störungsentwicklung des Hamiltonoperators schnell herleiten. In fünfter Ordnung folgt zum Beispiel

$$\begin{aligned} \hat{h}_5^{\text{hB}} = & \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0 - 3 \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^x \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^y \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^z \hat{T} \hat{P}_0 \\ & - 1 \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^x \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^y \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{S}^z \hat{T} \hat{P}_0 + 2 \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^x \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^y \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^z \hat{T} \hat{P}_0. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Die Koeffizienten  $b = -3$ ,  $c = -1$  und  $d = 2$  resultieren aus den Gleichungen

$$\begin{aligned} \text{i.} \quad & 9a + 6b + 3c + 6d = 0 \\ \text{ii.} \quad & 6a + 5b + 3c + 6d = 0 \\ \text{iii.} \quad & a + 2b + c + 3d = 0, \end{aligned} \quad (5.13)$$

welche sich durch Betrachtung der jeweiligen unverbundenen Graphen in Abbildung 5.1 c) ergeben. Der Term  $\hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \dots \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0$ , worin in  $n$ -ter Ordnung der Operator  $\hat{T}$   $(n+1)$ -mal vorkommt und  $\hat{S}$  nur in erster Potenz auftritt, entsteht ausschließlich aus der Entwicklung

$$\hat{P}_0 \hat{P} \left( \lambda \hat{T} + U \hat{D} \right) \hat{P} \hat{P}_0 \quad (5.14)$$

und wird mit  $\lambda \hat{T}$   $n$ -mal, mit  $U \hat{D}$   $(-n + 1)$ -mal erzeugt. Daher ist  $a = 1$  in allen Ordnungen in  $1/U$ .

Die Parameter  $x$ ,  $y$  und  $z$  in jedem Term des Operators (5.12) werden so gewählt, daß die Summe aller Exponenten der  $\hat{S}$ -Operatoren 5 beträgt. Aus (5.12) ist ersichtlich, daß die Berechnung der fünften Ordnung,  $E_0^{(5)}$ , sehr aufwendig ist. Für die folgenden Betrachtungen ist  $E_0^{(5)}$  nicht erforderlich, da maximal die dritte Ordnung in  $1/U$  betrachtet werden soll.

## 5.2 Greenfunktion zur Ordnung $1/U$

### 5.2.1 Formverändernde Anteile

Wie im Falicov-Kimball Modell führen die in (3.21) eingehenden, Terme der Entwicklung der Fermioperatoren (3.22) enthaltenden Ausdrücke nicht zur Renormierung der Energielücke, sondern nur zur Modifikation der Zustandsdichte.

Der zu betrachtende Anteil erster Ordnung in  $1/U$  lautet

$$\begin{aligned} G_{1,\alpha}(z) &= \frac{1}{L} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{P}_0 \hat{c}_{j\sigma} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0 \right\rangle + \text{H.c.} \\ &= \frac{1}{L} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-1} \sum_{\langle j,k \rangle} \sum_{\tilde{\sigma}} \hat{c}_{j\sigma} \hat{c}_{j\tilde{\sigma}}^\dagger \hat{c}_{k\tilde{\sigma}} \right\rangle + \text{H.c.} \end{aligned} \quad (5.15)$$

Jeder Summand obiger Gleichung enthält die Gesamtheit der vom Gitterplatz  $\mathbf{k}$  zum Nachbarplatz  $\mathbf{j}$  führenden Pfade eines in  $\mathbf{k}$  erzeugten Loches.

Die Menge aller Pfade, welche zwei  $m$  Schritte voneinander entfernte Gitterplätze auf einem Bethegitter im Limes  $Z \rightarrow \infty$  verbinden, ist gegeben durch

$$\frac{1}{Z^m} S(Z)^{m+1} = \frac{1}{Z^m} \frac{1}{(2Z)^{m+1}} [Z \pm \sqrt{Z^2 - 4}]^{m+1}. \quad (5.16)$$

Da innerhalb des in (5.15) stattfindenden Prozesses ein Spinflip erfolgen kann, gilt mit  $m = 1$

$$\begin{aligned} G_{1,\alpha}(z) &= -\frac{1}{U} \frac{G_0(z)^2}{z^4} \left\langle \sum_{\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\pm\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{j}\pm\sigma} \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \right\rangle + \text{H.c.} \\ &= -\frac{1}{UL} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{h}_0 [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle \frac{1}{2} \left\langle 1 - 4\hat{S}_{\mathbf{k}} \hat{S}_{\mathbf{l}} \right\rangle + \text{H.c.} \end{aligned} \quad (5.17)$$

Aufgrund fehlender Spinkorrelationen folgt für die formverändernden Anteile erster Ordnung in  $1/U$  im Hubbard Modell schließlich

$$G_{1,\alpha}(z) = -\frac{1}{U} \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}\sigma} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^\dagger \hat{h}_0 [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma} \right\rangle . \quad (5.18)$$

### 5.2.2 Effektiver Operator der Lochbewegung

Einschließlich erster Ordnung in  $1/U$  ergibt sich der nur aus der Entwicklung des Hamiltonoperators resultierende Beitrag zur Greenfunktion

$$\begin{aligned} G_{1,\beta}(z) &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}\sigma} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^\dagger [z + \hat{h}_0 + \hat{h}_1]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma} \right\rangle \\ &= G_0(z) + \tilde{G}_1(z) + \mathcal{O}(U^{-2}) \end{aligned} \quad (5.19)$$

mit dem zu berechnenden Term

$$\tilde{G}_1(z) = -\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}\sigma} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{h}_1 [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma} \right\rangle . \quad (5.20)$$

Der Operator  $\hat{h}_1$  ist Summe des Zweiplatzanteils

$$\hat{h}_1^{2s} = -\hat{P}_0 \left( \frac{1}{ZU} \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{l} \rangle \sigma} \hat{c}_{\mathbf{i}\pm\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{l}\pm\sigma} \hat{c}_{\mathbf{l}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}\sigma} + E_0^{(1)} \right) \hat{P}_0 , \quad (5.21)$$

wobei  $E_0^{(1)} = -L/(2U)$  den in Abschnitt 5.1 angegebenen Beitrag erster Ordnung zur Grundzustandsenergie des Isolators darstellt, und des Dreiplatzanteils

$$\hat{h}_1^{3s} = -\frac{1}{ZU} \hat{P}_0 \sum_{\substack{\langle \mathbf{i}, \mathbf{l} \rangle, \langle \mathbf{l}, \mathbf{k} \rangle \sigma \\ \mathbf{i} \neq \mathbf{k}}} (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}) (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}-\sigma}) \hat{c}_{\mathbf{k}\pm\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{l}\pm\sigma} (\hat{c}_{\mathbf{l}-\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{l}-\sigma}) \hat{c}_{\mathbf{l}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}\sigma} \hat{P}_0 . \quad (5.22)$$

Für den  $\hat{h}_1^{2s}$  enthaltenden und in (5.20) eingehenden Term folgt

$$\begin{aligned} &\frac{1}{LZU} \sum_{\mathbf{j}\sigma} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{P}_0 \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{l} \rangle \sigma} \left( \hat{c}_{\mathbf{i}\pm\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{l}\pm\sigma} \hat{c}_{\mathbf{l}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}\sigma} - \frac{1}{2} \right) \hat{P}_0 [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma} \right\rangle \\ &= -\frac{1}{U} \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}\sigma} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-2} \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma} \right\rangle , \end{aligned} \quad (5.23)$$

da der in  $E_0^{(1)}$  aufsummierte Prozeß bei Anwesenheit eines Loches bei  $Z$  Paaren genau  $2Z$  mal nicht stattfinden kann.

Der Dreiplatzanteil  $\hat{h}_1^{3s}$  entfernt ein vorhandenes Loch (i) um zwei Schritte zusätzlich vom Ausgangsplatz  $\mathbf{j}$ , (ii) ändert seine Entfernung vom Ausgangsort nicht oder (iii) reduziert seine Distanz vom Ausgangsort um zwei Schritte. Alle drei Prozesse liefern den gleichen Beitrag zum Dreiplatzanteil in (5.20), welcher sich mit Hilfe von (5.16) zu

$$\frac{[S(z)]^4}{z^4} \left[ 1 - \frac{[S(z)]^2}{z^2} \right]^{-1} \quad (5.24)$$

ergibt. Mit Anwendung der Beziehung

$$\left\langle \sum_{\sigma} \hat{c}_{1\pm\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}\pm\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{1\sigma} \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle 1 - 4\hat{S}_{\mathbf{k}}\hat{S}_1 \right\rangle \quad (5.25)$$

ist

$$\begin{aligned} -\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}\sigma} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^{\dagger} [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{P}_0 \hat{h}_1^{3s} [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma} \right\rangle &= \frac{3}{2U} \frac{[S(z)]^4}{z^4} \left[ 1 - \frac{[S(z)]^2}{z^2} \right]^{-1} \\ &= -\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}\sigma} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^{\dagger} [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{P}_0 \left( \frac{1}{2U} - \frac{\hat{h}_0^2}{2U} \right) [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma} \right\rangle. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Aus (5.23) und (5.26) folgt, daß  $\hat{h}_1$  durch

$$\hat{h}_1 \rightarrow \hat{h}_1^{\text{eff}} = -\frac{1}{2U} (\hat{h}_0)^2 + \frac{3}{2U} \quad (5.27)$$

ersetzt werden kann. Der Ausdruck

$$G_1(z) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}\sigma} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^{\dagger} \left( 1 - \frac{\hat{h}_0}{U} \right) \left[ z + \hat{h}_0 + \frac{3 - (\hat{h}_0)^2}{2U} \right]^{-1} \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma} \right\rangle \quad (5.28)$$

enthält somit die exakte Korrektur erster Ordnung in  $1/U$  zur Greenfunktion im Hubbard Modell.



### 5.2.3 Zustandsdichte zur Ordnung $1/U$

Mit der bekannten Zustandsdichte des Operators  $\hat{h}_0$ , (3.30), folgt die Zustandsdichte für das untere Hubbard-Band zur Ordnung  $1/U$

$$\begin{aligned}
 D_1(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \rho(\epsilon) \left(1 - \frac{\epsilon}{U}\right) \delta\left(\omega + \frac{U}{2} + \epsilon + \frac{3 - \epsilon^2}{2U}\right) \\
 &= \rho\left(U - \sqrt{2U^2 + 2U\omega + 3}\right) \\
 &= \frac{1}{2\pi} \left[4 - \left(U - \sqrt{2U^2 + 2U\omega + 3}\right)^2\right]^{1/2}, \quad \left|\omega + \frac{U}{2} - \frac{1}{2U}\right| \leq 2.
 \end{aligned} \tag{5.29}$$

Damit ist  $\mu_{\text{UHB}}^+ = -U/2 + 2 + 1/(2U)$  und die Lücke ergibt sich zu

$$\Delta_1(U) = U - 4 - \frac{1}{U} \tag{5.30}$$

bis einschließlich erster Ordnung in  $1/U$ .

## 5.3 Greenfunktion zur Ordnung $1/U^2$

### 5.3.1 Formverändernde Anteile

In die Greenfunktion (3.21) gehen zusammen mit den hermitesch konjugierten Ausdrücken folgende, Anteile der Entwicklung der Fermioperatoren (3.22) enthal-

tende Terme zweiter Ordnung in  $1/U$  ein

$$\begin{aligned} G_{2,\alpha}(z) &= -\frac{1}{L} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{T} \hat{S}^1 \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{P}_0 [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{h}_1 [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle \\ &= -\frac{1}{L} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^\dagger (s_{2;3,\alpha}(\hat{h}_0)^3 + s_{2;1,\alpha} \hat{h}_0) [z + \hat{h}_0]^{-2} \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle, \end{aligned} \quad (5.31)$$

$$\begin{aligned} G_{2,\beta}(z) &= \frac{1}{L} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{P}_0 [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{P}_0 \hat{c}_{j\sigma} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \right\rangle \\ &= \frac{1}{L} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^\dagger (s_{2;2,\beta}(\hat{h}_0)^2 + s_{2;0,\beta}) [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle, \end{aligned} \quad (5.32)$$

$$\begin{aligned} G_{2,\gamma}(z) &= \frac{1}{L} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{P}_0 [z + \hat{h}_0]^{-1} \left[ \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{c}_{j\sigma} \hat{S}^1 \hat{T} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{2} \hat{P}_0 \hat{c}_{j\sigma} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{P}_0 - \frac{1}{2} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{P}_0 \hat{c}_{j\sigma} \hat{P}_0 \right] \right\rangle \\ &= \frac{1}{L} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^\dagger (s_{2;2,\gamma}(\hat{h}_0)^2 + s_{2;0,\gamma}) [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle, \end{aligned} \quad (5.33)$$

$$\begin{aligned} G_{2,\delta}(z) &= \frac{1}{L} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{T} \hat{S}^1 \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{P}_0 [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{P}_0 \hat{c}_{j\sigma} \hat{S}^1 \hat{T} \right\rangle \\ &= \frac{1}{L} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^\dagger (s_{2;2,\delta}(\hat{h}_0)^2 + s_{2;0,\delta}) [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle. \end{aligned} \quad (5.34)$$

Zur Berechnung der in  $G_{2,\alpha}(z)$  auftretenden Faktoren werden die Ergebnisse des letzten Abschnitts verwendet. Aus (5.17) folgt, daß  $\hat{T} \hat{S}^1 \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{P}_0$  ersetzt werden kann durch

$$\hat{T} \hat{S}^1 \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{P}_0 \rightarrow -\frac{1}{2U} \hat{h}_0. \quad (5.35)$$

Für  $\hat{h}_1$  ergab sich die Ersetzung

$$\hat{h}_1 \rightarrow \hat{h}^{\text{eff}} = -\frac{1}{2U} (\hat{h}_0)^2 + \frac{3}{2U}. \quad (5.36)$$

Damit ist

$$(s_{2;3,\alpha}(\hat{h}_0)^3 + s_{2;1,\alpha} \hat{h}_0) = -\frac{1}{2U} \hat{h}_0 \left( -\frac{1}{2U} (\hat{h}_0)^2 + \frac{3}{2U} \right) \quad (5.37)$$

und die Unbekannten lauten

$$s_{2;3,\alpha} = \frac{1}{4U^2}, \quad s_{2;1,\alpha} = -\frac{3}{4U^2}. \quad (5.38)$$

Die Faktoren in  $G_{2,\beta}(z)$ ,  $G_{2,\gamma}(z)$  und  $G_{2,\delta}(z)$  können durch Auswertung der durch Abbruch der Entwicklung von  $[z + \hat{h}_0]^{-1}$  jeweils nach der ersten und der dritten Ordnung in  $z$  resultierenden Gleichungen berechnet werden.

Für den in  $G_{2,\beta}(z)$  auftretenden Term erster Ordnung ergibt sich

$$\sum_{\sigma} \langle \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger} \hat{P}_0 \hat{c}_{j\sigma} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \rangle = 0, \quad (5.39)$$

da der Operator  $\hat{P}_0 \hat{c}_{j\sigma} \hat{S}^1$  die Anwesenheit des Loches auf Gitterplatz  $\mathbf{j}$  verbietet, während der Erzeuger  $\hat{c}_{j\sigma}^{\dagger}$  sie dort verlangt. Es folgt

$$\sum_{\sigma} \langle \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger} (s_{2;2,\beta}(\hat{h}_0)^2 + s_{2;0,\beta}) \hat{c}_{j\sigma} \rangle = s_{2;2,\beta} + s_{2;0,\beta} = 0. \quad (5.40)$$

In der dritten Ordnung gilt

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma} \langle \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger} (\hat{h}_0)^2 \hat{P}_0 \hat{c}_{j\sigma} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \rangle \\ &= \frac{1}{4U^2} \langle (1 - 4\hat{S}_{\mathbf{j}}\hat{S}_{\mathbf{k}}) (1 - 4\hat{S}_{\mathbf{k}}\hat{S}_{\mathbf{l}}) \rangle + \frac{1}{2U^2} \langle 1 - 4\hat{S}_{\mathbf{j}}\hat{S}_{\mathbf{k}} \rangle. \end{aligned} \quad (5.41)$$

Darin ist  $\mathbf{j}$  einer der nächsten Nachbarn von  $\mathbf{k}$  und übernächster Nachbar von  $\mathbf{l}$ . Aufgrund fehlender Spinkorrelationen lautet die zweite Gleichung somit

$$\sum_{\sigma} \langle \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger} (s_{2;2,\beta}(\hat{h}_0)^4 + s_{2;0,\beta}(\hat{h}_0)^4) \hat{c}_{j\sigma} \rangle = 2s_{2;2,\beta} + s_{2;0,\beta} = \frac{3}{4U^2}. \quad (5.42)$$

Mit (5.40) und der obigen Beziehung ergibt sich

$$s_{2;2,\beta} = \frac{3}{4U^2}, \quad s_{2;0,\beta} = -\frac{3}{4U^2}. \quad (5.43)$$

Für die in  $G_{2,\gamma}(z)$  eingehenden Terme gilt

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} \left( \langle \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{c}_{j\sigma} \hat{S}^1 \hat{T} \rangle - \frac{1}{2} \left[ \langle \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger} \hat{P}_0 \hat{c}_{j\sigma} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{P}_0 \rangle \right. \right. \\ \left. \left. + \langle \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{P}_0 \hat{c}_{j\sigma} \hat{P}_0 \rangle \right] \right) = -\frac{1}{2U^2} \langle 1 - 4\hat{S}_{\mathbf{k}}\hat{S}_{\mathbf{l}} \rangle. \end{aligned} \quad (5.44)$$

Damit ist

$$s_{2;2,\gamma} + s_{2;0,\gamma} = -\frac{1}{2U^2}. \quad (5.45)$$

Der Operator  $\hat{P}_0(\hat{h}_0)^2\hat{P}_0$  verschiebt ein Loch um zwei Gitterplätze oder ändert seinen Zustand nicht

$$\hat{P}_0(\hat{h}_0)^2\hat{P}_0 = \frac{1}{ZU^2} \left( \sum_{\langle \mathbf{k}, \mathbf{l} \rangle} \hat{c}_{\mathbf{l}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger (1 - \hat{n}_{\mathbf{k}-\sigma}) \hat{c}_{\mathbf{l}\sigma} + \sum_{\substack{\langle \mathbf{k}, \mathbf{m} \rangle, \langle \mathbf{m}, \mathbf{l} \rangle \\ \mathbf{l} \neq \mathbf{k}}} \hat{c}_{\mathbf{m}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{l}\sigma}^\dagger (1 - \hat{n}_{\mathbf{l}-\sigma}) \hat{c}_{\mathbf{m}\sigma} \right) . \quad (5.46)$$

Daher tragen alle in (5.44) enthaltenen Prozesse zum Ausdruck zweiter Ordnung bei und es gilt

$$\sum_{\sigma} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^\dagger \hat{P}_0 (\hat{h}_0)^2 \left( \hat{T} \hat{S}^1 \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma} \hat{S}^1 \hat{T} - \frac{1}{2} \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{P}_0 - \frac{1}{2} \hat{T} \hat{S}^2 \hat{P}_0 \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma} \hat{P}_0 \right) \right\rangle \quad (5.47)$$

$$= -\frac{1}{2U^2} + \frac{1}{4U^2} = -\frac{1}{4U^2} . \quad (5.48)$$

Aus der resultierenden Gleichung

$$2s_{2;2,\gamma} + s_{2;0,\gamma} = -\frac{1}{4U^2} \quad (5.49)$$

und (5.45) folgt schließlich

$$s_{2;2,\gamma} = \frac{1}{4U^2} , \quad s_{2;0,\gamma} = -\frac{3}{4U^2} . \quad (5.50)$$

Die in  $G_{2,\delta}(z)$  eingehenden Terme liefern zunächst

$$\sum_{\sigma} \left\langle \hat{T} \hat{S}^1 \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^\dagger \hat{P}_0 \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma} \hat{S}^1 \hat{T} \right\rangle = \frac{1}{2U^2} \left\langle 1 - 4\hat{S}_{\mathbf{k}} \hat{S}_{\mathbf{j}} \right\rangle , \quad (5.51)$$

sodaß

$$s_{2;2,\delta} + s_{2;0,\delta} = \frac{1}{2U^2} . \quad (5.52)$$

In folgender Ordnung ergibt sich

$$\sum_{\sigma} \left\langle \hat{T} \hat{S}^1 \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^\dagger (\hat{h}_0)^2 \hat{P}_0 \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma} \hat{S}^1 \hat{T} \right\rangle = \frac{1}{2U^2} + \frac{1}{4U^2} , \quad (5.53)$$

Der erste Summand obiger Gleichung entsteht durch die in (5.51) eingehenden Prozesse. Damit ist

$$2s_{2;2,\delta} + s_{2;0,\delta} = \frac{3}{4U^2} \quad (5.54)$$

und es folgt

$$s_{2;2,\delta} = \frac{1}{4U^2}, \quad s_{2;0,\delta} = \frac{1}{4U^2}. \quad (5.55)$$

Insgesamt gilt mit Berücksichtigung der hermitesch konjugierten Terme

$$\hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} = \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{P}_0 \left[ 1 - \frac{1}{U} \hat{h}_0 + \frac{9}{4U^2} ((\hat{h}_0)^2 - 1) \right] \hat{c}_{j\sigma} \hat{P}_0 + (U^{-3}) \quad (5.56)$$

für die formverändernden Anteile einschließlich zweiter Ordnung in  $1/U$  im Hubbard Modell.

### 5.3.2 Effektiver Operator der Lochbewegung

Bis zur zweiten Ordnung in  $1/U$  ergibt sich der ausschließlich aus der Entwicklung des Hamiltonoperators resultierende Ausdruck

$$\begin{aligned} G_{2,\epsilon}(z) &= \frac{1}{L} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \left[ z + \hat{h}_0 + \hat{h}_1 + \hat{h}_2 \right]^{-1} \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle \\ &= G_0(z) + \tilde{G}_1(z) + \tilde{G}_2(z) + \mathcal{O}(U^{-3}), \end{aligned} \quad (5.57)$$

mit

$$\tilde{G}_2(z) = \frac{1}{L} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \left[ z + \hat{h}_0 \right]^{-1} \left[ \hat{h}_1 \left[ z + \hat{h}_0 \right]^{-1} \hat{h}_1 - \hat{h}_2 \right] \left[ z + \hat{h}_0 \right]^{-1} \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle. \quad (5.58)$$

Der Operator  $\hat{h}_1$  kann durch den effektiven Ausdruck (5.27) ersetzt werden und liefert daher keinen Beitrag zu  $\hat{h}_2^{\text{eff}}$ . Zu berechnen ist damit der in  $\tilde{G}_2(z)$  eingehende Anteil

$$\begin{aligned} &\frac{1}{L} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \left[ z + \hat{h}_0 \right]^{-1} \hat{h}_2 \left[ z + \hat{h}_0 \right]^{-1} \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle \\ &= \frac{1}{L} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \left( g_{2;3} (\hat{h}_0)^3 + g_{2;1} \hat{h}_0 \right) \left[ z + \hat{h}_0 \right]^{-2} \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle. \end{aligned} \quad (5.59)$$

In zweiter Ordnung in  $z$  gilt

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger} \left( \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0 - \frac{1}{2} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{P}_0 - \frac{1}{2} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{P}_0 \right) \hat{h}_0 \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle \\ &= -\frac{3}{2U^2} \left\langle 1 - 4\hat{S}_{\mathbf{k}} \hat{S}_{\mathbf{l}} \right\rangle, \end{aligned} \quad (5.60)$$

wobei  $\mathbf{k}$  und  $\mathbf{l}$  übernächste Nachbarn darstellen. Damit ist

$$\sum_{\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger} \left( g_{2;3} (\hat{h}_0)^4 + g_{2;1} (\hat{h}_0)^2 \right) \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle = 2g_{2;3} + g_{2;1} = -\frac{3}{2U^2}. \quad (5.61)$$

Die vierte Ordnung liefert

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger} \left( \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{P}_0 - \frac{1}{2} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{P}_0 - \frac{1}{2} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{P}_0 \hat{T} \hat{P}_0 \right) (\hat{h}_0)^3 \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle \\ &= \frac{1}{U^2} \left( -2 \left\langle 1 - 4\hat{S}_{\mathbf{k}} \hat{S}_{\mathbf{l}} \right\rangle - \frac{1}{4} \left\langle \left( 1 - 4\hat{S}_{\mathbf{k}} \hat{S}_{\mathbf{m}} \right) \left( 1 - 4\hat{S}_{\mathbf{m}} \hat{S}_{\mathbf{l}} \right) \right\rangle \right). \end{aligned} \quad (5.62)$$

Der Operator  $(\hat{h}_0)^3$  entfernt das bei  $\mathbf{j}$  erzeugte Loch um einen oder um drei Gitterplätze vom Ausgangsort. Mit der ersten Möglichkeit geht der Ausdruck (5.60) vollständig in die obige Gleichung ein, bei welcher  $\langle \mathbf{m}, \mathbf{l} \rangle$  und  $\langle \mathbf{m}, \mathbf{k} \rangle$  Paare nächster Nachbarn bedeuten. Es folgt

$$\sum_{\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger} \left( g_{2;3} (\hat{h}_0)^6 + g_{2;1} (\hat{h}_0)^4 \right) \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle = (5g_{2;3} + 2g_{2;1}) = -\frac{9}{4U^2}. \quad (5.63)$$

Mit (5.61) und (5.63) ergibt sich

$$g_{2;3} = \frac{3}{4U^2}, g_{2;1} = -\frac{3}{U^2}. \quad (5.64)$$

Der Operator  $\hat{h}_2$  kann somit durch den effektiven Operator

$$\hat{h}_2 \rightarrow \hat{h}_2^{\text{eff}} = \frac{3}{4U^2} \hat{h}_0 \left( (\hat{h}_0)^2 - 4 \right) \quad (5.65)$$

ersetzt werden und mit dem Ausdruck (5.56) für die effektiven Fermioperatoren lautet die Greenfunktion

$$\begin{aligned} G_2(z) = \frac{1}{L} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger} \left( 1 - \frac{\hat{h}_0}{U} + \frac{9[(\hat{h}_0)^2 - 1]}{4U^2} \right) \right. \\ \left. \left[ z + \hat{h}_0 + \frac{3 - (\hat{h}_0)^2}{2U} + \frac{3\hat{h}_0}{4U^2} \left( (\hat{h}_0)^2 - 4 \right) \right]^{-1} \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle \end{aligned} \quad (5.66)$$

einschließlich dem exakten Beitrag zweiter Ordnung in  $(1/U)$ .

### 5.3.3 Zustandsdichte zur Ordnung $1/U^2$

Mit der Korrektur zweiter Ordnung folgt die Zustandsdichte

$$D_2(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \rho(\epsilon) \left( 1 - \frac{\epsilon}{U} + \frac{9(\epsilon^2 - 1)}{4U^2} \right) \delta \left( \omega + \frac{U}{2} + \epsilon + \frac{3 - \epsilon^2}{2U} + \frac{3\epsilon(\epsilon^2 - 4)}{4U^2} \right) \quad (5.67)$$

die explizit lautet

$$D_2(\omega) = \rho(\epsilon_\omega) \frac{1 - \epsilon_\omega/U + 9(\epsilon_\omega^2 - 1)/(4U^2)}{1 - \epsilon_\omega/U + 3(3\epsilon_\omega^2 - 4)/(4U^2)}, \quad \left| \omega + \frac{U}{2} - \frac{1}{2U} \right| \leq 2. \quad (5.68)$$

Darin ist  $\epsilon_\omega$  die reelle Lösung der Gleichung

$$\omega + \frac{U}{2} + \epsilon_\omega + \frac{3 - \epsilon_\omega^2}{2U} + \frac{3\epsilon_\omega(\epsilon_\omega^2 - 4)}{4U^2} = 0. \quad (5.69)$$

Aus (5.67) ist ersichtlich, daß  $\mu_{\text{UHB}}^+ = -U/2 + 2 + 1/(2U)$  keine Korrektur zweiter Ordnung enthält. Die Energielücke bleibt erhalten und es gilt

$$\Delta_2(U) = U - 4 - \frac{1}{U} = \Delta_1(U) \quad (5.70)$$

bis zur zweiten Ordnung in  $1/U$  im Hubbard Modell.

### 5.3.4 Selbstenergie

Die Einteilchen-Selbstenergie  $\Sigma(\omega)$  ist durch

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \frac{D_0(\epsilon)}{\omega - \epsilon + i \text{sgn}(\omega) 0^+ - \Sigma(\omega)} \quad (5.71)$$

$$= G_0(\omega - \Sigma(\omega)). \quad (5.72)$$

gegeben. Aufgrund der Teilchen-Loch Symmetrie gilt  $\Sigma(-\omega) = -\Sigma(\omega)$  und die Betrachtung des unteren Hubbard-Bandes,  $\omega \leq 0$ , genügt. Mit (3.29) und (5.72) folgt

$$\Sigma(\omega) = G_0(\omega) + \frac{1}{G_0(\omega)} - \omega \quad (5.73)$$

Der Imaginärteil und der Realteil der Selbstenergie lauten somit

$$\Im \Sigma(\omega) = \Im G(\omega) \left( 1 - \frac{1}{[\Re G(\omega)]^2 + [\Im G(\omega)]^2} \right), \quad (5.74)$$

$$\Re \Sigma(\omega) = \Re G(\omega) \left( 1 + \frac{1}{[\Re G(\omega)]^2 + [\Im G(\omega)]^2} \right) - \omega. \quad (5.75)$$

Es gilt

$$\Im G(\omega) = \pi D(\omega) \quad (5.76)$$

und mit Hilfe der Kramers-Kronig Relation ergibt sich

$$\Re G(\omega) = \mathcal{P} \int_{\mu^-}^{\mu^+} d\epsilon D(\epsilon) \left( \frac{1}{\omega - \epsilon} + \frac{1}{\omega + \epsilon} \right) \quad (5.77)$$

$$= \int_{\mu^-}^{\mu^+} d\epsilon \frac{D(\epsilon)}{\omega + \epsilon} + D(\omega) \ln \left| \frac{\omega - \mu^-}{\mu^+ - \omega} \right| - \int_{\mu^-}^{\mu^+} d\epsilon \frac{D(\epsilon) - D(\omega)}{\epsilon - \omega}. \quad (5.78)$$

Der mit der Zustandsdichte berechnete Real- und Imaginärteil der Einteilchen-Selbstenergie ist für  $U = 1.5W$  zusammen mit den mit Hilfe der Iterierten Störungstheorie (IPT) ermittelten Werten in den Abbildungen 6.6 und 6.7 des folgenden Kapitels gezeigt.

### 5.3.5 Momente der Zustandsdichte

Seien  $p_1(\hat{h}_0)$  und  $p_2(\hat{h}_0)$  Polynome in  $\hat{h}_0$ . Die Greenfunktion

$$G(\omega) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{j}\sigma} \left\langle \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma}^\dagger (1 + p_1(\hat{h}_0)) \frac{1}{\omega + p_2(\hat{h}_0)} \hat{c}_{\mathbf{j}\sigma} \right\rangle, \quad (5.79)$$

kann entwickelt werden in

$$G(\omega) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{S_{2n}^*}{\omega^{n+1}}. \quad (5.80)$$

Dabei enthält  $S_{2n}^*$  die Menge aller aus  $2n$  Schritten bestehenden Pfade eines Loches auf dem Bethegitter, die am selben Gitterplatz beginnen und enden und durch den aus

$$(1 + p_1(\hat{h}_0)) \sum_{n=0}^{\infty} \left( -\frac{p_2(\hat{h}_0)}{\omega} \right)^n \quad (5.81)$$



resultierenden Term  $2n$ -ter Ordnung in  $\hat{h}_0$  generiert werden. Die Momente  $M^{(n)}$  der Zustandsdichte lassen sich durch  $S_{2n}^*$  ausdrücken.

Es gilt

$$\begin{aligned} M^{(n)} &= \int_{\mu^-}^{\mu^+} d\omega \omega^n D(\omega) \\ &= \int_{\mu^-}^{\mu^+} d\omega \frac{\omega^n}{\pi} \Im G(\omega), \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (5.82)$$

Aufgrund der Analytizität von  $G(\omega)$  außerhalb des Intervalls  $[\mu^-, \mu^+]$  der reellen Achse, kann das Integral in obiger Gleichung durch ein Konturintegral ersetzt werden, wobei die Kontur in der komplexen Ebene um das Intervall herumgeführt werden muß. Verwendet man die Entwicklung (5.80) und deformiert die Kontur in einen Kreis mit dem Radius  $R = \max[|\mu^-|, |\mu^+|]$  folgt für die Momente

$$M^{(n)} = \oint d\omega \frac{\omega^n}{2\pi i} G(\omega) = S_{2n}^*. \quad (5.83)$$

Dabei wurde vorausgesetzt, daß das untere Hubbard-Band um  $\omega = 0$  zentriert ist. Berechnet man zum Beispiel die Momente der Zustandsdichte (5.28) ergibt sich

$$M^{(0)} = 1, \quad M^{(1)} = 0, \quad M^{(2)} = 1 - \frac{9}{4U^2}, \quad \dots \quad (5.84)$$

## 5.4 Einteilchen-Lücke zur Ordnung $1/U^3$

Die formverändernden Anteile sollen in der dritten Ordnung in  $1/U$  nicht mehr betrachtet werden. Zur Bestimmung der Lücke bis einschließlich dritter Ordnung ist

$$G_{3,\zeta}(z) = \frac{1}{L} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \left[ z + \hat{h}_0 + \hat{h}_1 + \hat{h}_2 + \hat{h}_3 \right]^{-1} \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle \quad (5.85)$$

$$= G_0(z) + \tilde{G}_1(z) + \tilde{G}_2(z) + \tilde{G}_3(z) + \mathcal{O}(U^{-4}) \quad (5.86)$$

mit

$$\tilde{G}_3(z) = \frac{1}{L} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \left[ z + \hat{h}_0 \right]^{-1} \left( \hat{h}_2 \left[ z + \hat{h}_0 \right]^{-1} \hat{h}_1 + \hat{h}_1 \left[ z + \hat{h}_0 \right]^{-1} \hat{h}_2 \right. \right. \quad (5.87)$$

$$\left. - \hat{h}_1 \left[ z + \hat{h}_0 \right]^{-1} \hat{h}_1 \left[ z + \hat{h}_0 \right]^{-1} \hat{h}_1 - \hat{h}_3 \right) \left[ z + \hat{h}_0 \right]^{-1} \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle \quad (5.88)$$

zu berechnen. Die in  $\tilde{G}_3(z)$  eingehenden,  $\hat{h}_1$  und  $\hat{h}_2$  enthaltenden Terme ergeben sich durch die Ersetzung  $\hat{h}_1 \rightarrow \hat{h}_1^{\text{eff}}$ , (5.27), und  $\hat{h}_2 \rightarrow \hat{h}_2^{\text{eff}}$ , (5.65). Sie tragen zu  $\hat{h}_3^{\text{eff}}$  nicht bei.

Für den  $\hat{h}_3$  enthaltenden Anteil gelte

$$\begin{aligned} \frac{1}{L} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^\dagger [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{h}_3 [z + \hat{h}_0]^{-1} \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle \\ = \frac{1}{L} \sum_{j\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^\dagger (g_{3;4}(\hat{h}_0)^4 + g_{3;2}(\hat{h}_0)^2 + g_{3;0}) [z + \hat{h}_0]^{-2} \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle . \end{aligned} \quad (5.89)$$

In niedrigster Ordnung in  $z$  ist der Ausdruck

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \left[ \hat{p}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{p}_0 - \frac{1}{2} (\hat{p}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{p}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{p}_0 + \hat{p}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{p}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{p}_0) \right. \right. \\ - \frac{1}{2} (\hat{p}_0 \hat{T} \hat{p}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{p}_0 + \hat{p}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{p}_0 \hat{T} \hat{p}_0 + \\ + \hat{p}_0 \hat{T} \hat{p}_0 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{p}_0 + \hat{p}_0 \hat{T} \hat{S}^2 \hat{T} \hat{S}^1 \hat{T} \hat{p}_0 \hat{T} \hat{p}_0) \\ \left. \left. + \frac{1}{2} (\hat{p}_0 \hat{T} \hat{S}^3 \hat{T} \hat{p}_0 \hat{T} \hat{p}_0 \hat{T} \hat{p}_0 + \hat{p}_0 \hat{T} \hat{p}_0 \hat{T} \hat{p}_0 \hat{T} \hat{S}^3 \hat{T} \hat{p}_0) \right] \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle \end{aligned} \quad (5.90)$$

zu betrachten. Die ersten drei Terme stellen den bei halber Bandfüllung wirksamen Operatorteil (5.9) dar. Bei Anwesenheit eines Loches gibt es genau  $Z(Z-1) + Z(Z-1)/2$  Dreiergruppen, an denen die durch diesen Operatorteil generierten Hüpfprozesse (5.9) nicht stattfinden können. Dies führt im Limes  $Z \rightarrow \infty$  und bei fehlenden Spin-Spin-Korrelationen zum in (5.90) eingehenden Beitrag

$$\frac{1}{U^3} \frac{3}{2} . \quad (5.91)$$

Die verbleibenden Terme generieren Prozesse, an welchen das in  $\mathbf{j}$  erzeugte Loch beteiligt ist. Diese tragen mit

$$-\frac{1}{U^3} \frac{1}{2} \quad (5.92)$$

zu (5.90) bei. Damit ist

$$\sum_{\sigma} \left\langle \hat{c}_{j\sigma} \hat{h}_3 \hat{c}_{j\sigma} \right\rangle = \frac{1}{U^3} , \quad (5.93)$$

und es folgt

$$\sum_{\sigma} \langle \hat{c}_{j\sigma} (g_{3;4}(\hat{h}_0)^4 + g_{3;2}(\hat{h}_0)^2 + g_{3;0}) \hat{c}_{j\sigma} \rangle = 2g_{3;4} + g_{3;2} + g_{3;0} = \frac{1}{U^3} \quad (5.94)$$

als erste Gleichung, welcher die drei Unbekannten genügen.

In der zweiten Ordnung in  $z$  ist

$$\langle \hat{c}_{j\sigma} \hat{h}_3 (\hat{h}_0)^2 \hat{c}_{j\sigma} \rangle \quad (5.95)$$

zu bestimmen. Die zur Gleichung (5.94) führenden Prozesse gehen auch in die betrachtete Ordnung ein. Prozesse, bei welchen das Loch durch  $\hat{h}_0$  zunächst um zwei Gitterplätze verschoben wird, können durch

$$\frac{1}{U^3} \left( \frac{3}{2} \langle 1 - 4\hat{S}_{\mathbf{k}}\hat{S}_{\mathbf{l}} \rangle - \frac{1}{2} \langle (1 - 4\hat{S}_{\mathbf{k}}\hat{S}_{\mathbf{l}})(1 - 4\hat{S}_{\mathbf{l}}\hat{S}_{\mathbf{m}}) \rangle \right) = \frac{1}{U^2} \quad (5.96)$$

ausgedrückt werden. Es folgt also

$$\sum_{\sigma} \langle \hat{c}_{j\sigma} (g_{3;4}(\hat{h}_0)^6 + g_{3;2}(\hat{h}_0)^4 + g_{3;0}(\hat{h}_0)^2) \hat{c}_{j\sigma} \rangle = 5g_{3;4} + 2g_{3;2} + g_{3;0} = \frac{2}{U^3}. \quad (5.97)$$

Zuletzt ist

$$\sum_{\sigma} \langle \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger} \hat{h}_3 (\hat{h}_0)^4 \hat{c}_{j\sigma} \rangle \quad (5.98)$$

zu ermitteln. Die in die erste Bestimmungsgleichung eingehenden Prozesse treten innerhalb der vierten Ordnung in  $z$  mit zweifachem Gewicht, die in (5.96) eingehenden Prozesse mit dreifachem Gewicht auf. Wird das Loch durch  $\hat{h}_0^4$  zunächst um vier Gitterplätze verschoben, entsteht der Term

$$\begin{aligned} \frac{1}{U^3} \left( -\frac{1}{2} \langle 1 - 4\hat{S}_{\mathbf{k}}\hat{S}_{\mathbf{l}} \rangle - \langle (1 - 4\hat{S}_{\mathbf{k}}\hat{S}_{\mathbf{l}})(1 - 4\hat{S}_{\mathbf{l}}\hat{S}_{\mathbf{m}}) \rangle \right. \\ \left. + \frac{1}{8} \langle (1 - 4\hat{S}_{\mathbf{k}}\hat{S}_{\mathbf{l}})(1 - 4\hat{S}_{\mathbf{l}}\hat{S}_{\mathbf{m}})(1 - 4\hat{S}_{\mathbf{m}}\hat{S}_{\mathbf{n}}) \rangle \right) = -\frac{1}{U^3} \frac{11}{8}. \end{aligned} \quad (5.99)$$

Insgesamt folgt mit (5.93), (5.98) und (5.99)

$$\langle \hat{c}_{j\sigma} (g_{3;4}(\hat{h}_0)^8 + g_{3;2}(\hat{h}_0)^6 + g_{3;0}(\hat{h}_0)^4) \hat{c}_{j\sigma} \rangle = 14g_{3;4} + 5g_{3;2} + 2g_{3;0} = \frac{29}{8U^3}. \quad (5.100)$$

Damit ist

$$g_{3;4} = -\frac{11}{8} \frac{1}{U^3}, \quad g_{3;2} = \frac{41}{8} \frac{1}{U^3}, \quad g_{3;0} = -\frac{11}{8} \frac{1}{U^3}. \quad (5.101)$$

Der Operator  $\hat{h}_3$  wirkt wie der effektive Operator  $\hat{h}_3^{\text{eff}}$

$$\hat{h}_3 \rightarrow \hat{h}_3^{\text{eff}} = -\frac{1}{8U^3} (11\hat{h}_0^4 - 41\hat{h}_0^2 + 11). \quad (5.102)$$

Damit liefert (5.85) den Faktor

$$\delta \left( \omega + \frac{U}{2} + \epsilon + \frac{3 - \epsilon^2}{2U} + \frac{3\epsilon(\epsilon^2 - 4)}{4U^2} - \frac{1}{8U^3} (11\epsilon^4 - 41\epsilon^2 + 11) \right) \quad (5.103)$$

zum Integranden der Zustandsdichte  $D(\omega)$ . Mit  $\epsilon = -2$  lautet die obere Bandkante des unteren Hubbard-Bandes

$$\mu_{\text{UHB}}^+ = -\frac{U}{2} + 2 + \frac{1}{2U} + \frac{23}{8U^3}, \quad (5.104)$$

woraus sich die Energielücke einschließlich dritter Ordnung in  $1/U$  zu

$$\Delta_3(U) = U - 4 - \frac{1}{U} - \frac{23}{4U^3} \quad (5.105)$$

ergibt. Aus (5.105) ist ersichtlich, daß eine Minderung der Wechselwirkung, im Gegensatz zum Falicov-Kimball Modell, die Verkleinerung der Lücke bewirkt: Die Hubbard-Bänder "ziehen sich an".

Terme gerader Ordnung in  $1/U$  treten in der Entwicklung des Ausdrucks für die exakte Energielücke im eindimensionalen Hubbard Modell nicht auf, was aus der Analytizität der Energielücke für alle  $\Re U > 0$  mit einem Schnitt bei  $\Re U = 0$  und der innerhalb dieses Modells existierenden Teilchen-Loch Symmetrie resultiert. Dieselben Analytizitätseigenschaften werden auch hier als gültig angenommen.

Mit  $\Delta_n(U_c^{(n)}) = 0$  folgt

$$U_c^{(0)} = 4, \quad U_c^{(1)} = 4.24, \quad U_c^{(2)} = 4.24, \quad U_c^{(3)} = 4.30, \quad U_c^{(4)} = U_c^{(3)}. \quad (5.106)$$

Um die Korrektur fünfter Ordnung in  $1/U$  abzuschätzen, betrachte

$$\Delta(U) = U - 4t - 2t \frac{1}{4} \left( \frac{2t}{U} \right)^1 - 2t \frac{23}{64} \left( \frac{2t}{U} \right)^3 - 2t \times \left( \frac{2t}{U} \right)^5 + \dots \quad (5.107)$$

Mit Annahme von  $\kappa = \mathcal{O}(1)$  erhält man für die kritische Wechselwirkung

$$U_c = (1.08 \pm 0.01) W . \quad (5.108)$$

Abbildung 6.2 zeigt die mit der Hubbard-III Näherung, dem Local Moment Zugang und der Störungsentwicklung ermittelte Lücke für Ladungsanregungen im Hubbard Modell.

## 6 Vergleiche mit analytischen Näherungsverfahren

Die im letzten Kapitel gewonnenen Ergebnisse für den Mott-Hubbard Isolator werden in den folgenden Abschnitten mit weiteren analytischen Näherungsverfahren, wie der Hubbard-III Näherung, dem Local Moment Zugang und der Iterierten Störungstheorie verglichen und die Verfahren anschließend qualitativ beurteilt.

### 6.1 Hubbard-III Näherung

Im Falicov-Kimball Modell ist eine der Elektronenspezies, zum Beispiel die Elektronen mit Spin  $-\sigma$ , immobil. Die Hubbard-III Näherung resultiert aus der Erweiterung dieses Modells um die Annahme der Beweglichkeit beider Elektronensorten. Prozesse, wie das Verlassen eines Gitterplatzes durch ein  $-\sigma$  Elektron bei Ankunft eines  $\sigma$  Elektrons und die Streuung von  $-\sigma$  Löcher an  $\sigma$  Elektronen, werden mit der Aufnahme der jeweiligen Streukorrekturen  $\Delta_{-\sigma}(\omega)$  und  $-\Delta_{-\sigma}(U - \omega)$  in die Selbstenergie der Hubbard-I Näherung berücksichtigt. In der paramagnetischen Phase und beim halbgefüllten Band ist die gesamte Streukorrektur dann durch  $\Delta_{\sigma}^{\text{tot}}(\omega) = 3\Delta_{\sigma}(\omega)$  gegeben. Damit wird die Dynamik der lokalen magnetischen Momente teilweise erfaßt und man erhält folgende kubische Gleichung für die Greenfunktion [10]

$$3[G_{\text{H-III}}(\omega)]^3 - 8\omega[G_{\text{H-III}}(\omega)]^2 + 4G_{\text{H-III}}(\omega) \left(3 + \omega^2 - (U/2)^2\right) - 8\omega = 0 . \quad (6.1)$$

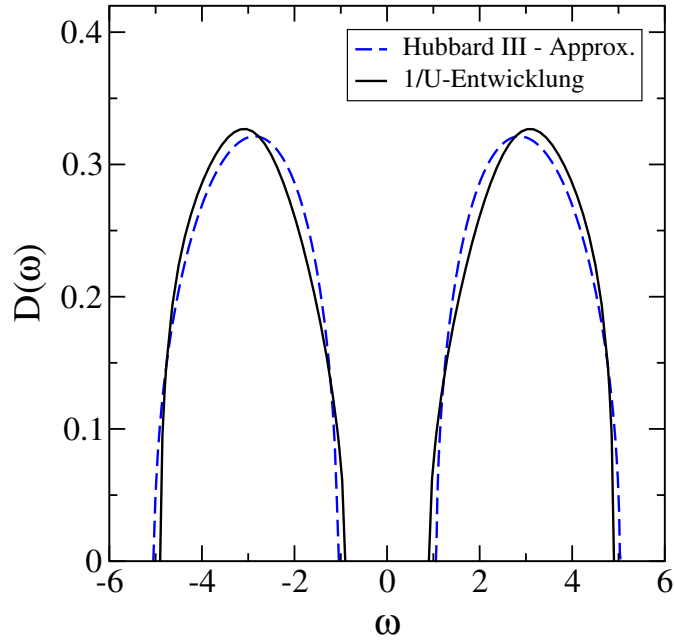


Abbildung 6.1: Zustandsdichte im Hubbard Modell für  $U = 6$ . Die gestrichelte Linie stellt die mit der Hubbard-III Näherung erhaltenen Werte dar, die durchgezogene Linie gibt das Ergebnis der  $1/U$ -Entwicklung in welcher die formverändernden Faktoren einschließlich der zweiten, die Korrektur zur Lücke einschließlich der dritten Ordnung in  $1/U$  berücksichtigt wurden, wieder.

Der Ausdruck niedrigster Ordnung in  $1/U$  ergibt sich zu  $G_0(\omega)$ , (3.29), und die Entwicklung der Energielücke lautet

$$\Delta_1^{\text{H-III}}(U) = U - 4 + \frac{1}{2U} + \frac{1.125}{U^2} + \dots \quad (6.2)$$

Darin besitzt der Term erster Ordnung in  $1/U$ , im Gegensatz zum Ergebnis der Störungsentwicklung, ein positives Vorzeichen, wodurch eine Minderung der Wechselwirkung zur Vergrößerung der Lücke führt. Der Mott-Hubbard Übergang erfolgt bei  $U_c^{\text{H-III}} = 2\sqrt{3} = 3.46 = 0.866W$ . Aufgrund der unvollständig berücksichtigten

Dynamik ist der Hubbard-III Isolator stabiler als der durch die Störungsentwicklung beschriebene. In Abbildung 6.1 ist die sich aus der Störungsentwicklung und der Hubbard-III Näherung ergebende Zustandsdichte bei  $U = 6$  dargestellt. Die Hubbard-III Bänder besitzen die volle Breite,  $W_{1,2} = W$ , neben der überschätzten Lücke ist jedoch eine umgekehrte Neigung der Bänder gegeben. Abbildung 6.2 zeigt die mit der Hubbard-III Näherung und der Störungsentwicklung ermittelte Energielücke im Vergleich. Es stellt sich heraus, daß die Hubbard-III Näherung keine passende Beschreibung des Mott-Hubbard Isolators liefert.

## 6.2 Local Moment Zugang

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der  $1/U$ -Entwicklung mit den durch den Local Moment Zugang (LMA) [26] erhaltenen Daten verglichen.

Die mit dem Local Moment Zugang berechnete Energielücke nimmt in Abhängigkeit der Wechselwirkung folgende Werte an [27]

$$\Delta^{\text{LMA}}(U = 11.313) = 7.15069, \quad \Delta^{\text{LMA}}(U = 8.4658) = 4.22595. \quad (6.3)$$

Damit ergibt sich approximativ

$$\Delta_2^{\text{LMA}}(U) = U - 4 - \frac{1.26}{U} - \frac{6.5}{U^2}. \quad (6.4)$$

Der Korrekturterm erster Ordnung in  $1/U$  obiger Gleichung weicht nur gering vom entsprechenden Ausdruck der Störungsentwicklung ab, bei welcher Terme gerader Ordnung in der Entwicklung der Lücke nicht vorhanden sind. Der Local Moment Zugang liefert daher eine größere kritische Wechselwirkung,  $U_c^{\text{LMA}} \approx 4.82 = 1.21W$ , als die Störungstheorie einschließlich zweiter Ordnung mit  $U_c^{(2)} = 4.24 \approx 1.06W$  und unterschätzt damit die Stabilität des Isolators, wie aus Abbildung 6.2 ersichtlich ist.

Abbildung 6.3 enthält die LMA-Zustandsdichte des Isolators für  $U = 4\sqrt{2} \approx 5.66 = 1.42W$  zusammen mit dem Ergebnis der Störungstheorie einschließlich der dritten Ordnung in  $1/U$ . Als Energieeinheit wurde hier  $t^* = t/\sqrt{2}$  gewählt und die Zustandsdichte entsprechend skaliert. Die Übereinstimmung der Kurven ist fast perfekt. Die größte Abweichung tritt im Bereich der Bandkanten auf.



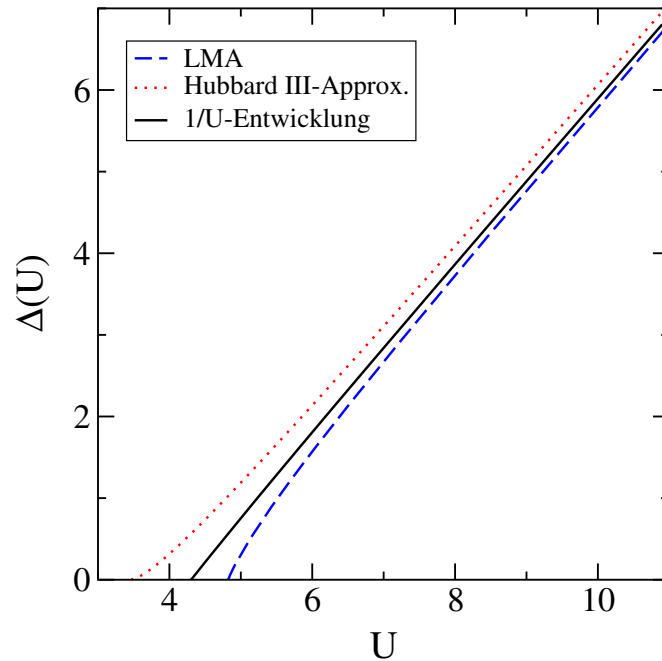


Abbildung 6.2: Mit dem LMA, der Hubbard-III Näherung und der Störungsentwicklung ermittelte Mott-Hubbard Lücke. Gepunktete Kurve: Hubbard-III Näherung. Durchgezogene Kurve:  $1/U$ -Entwicklung einschließlich dritter Ordnung in  $1/U$ . Gestrichelte Kurve: Local Moment Zugang.

Für Wechselwirkungen  $U > 1.4W$  liefert der Local Moment Zugang somit eine sehr gute Beschreibung des Isolators.

## 6.3 Iterierte Störungstheorie

Zuletzt werden die Ergebnisse der Iterierten Störungstheorie (IPT) mit denen der Störungsentwicklung verglichen.

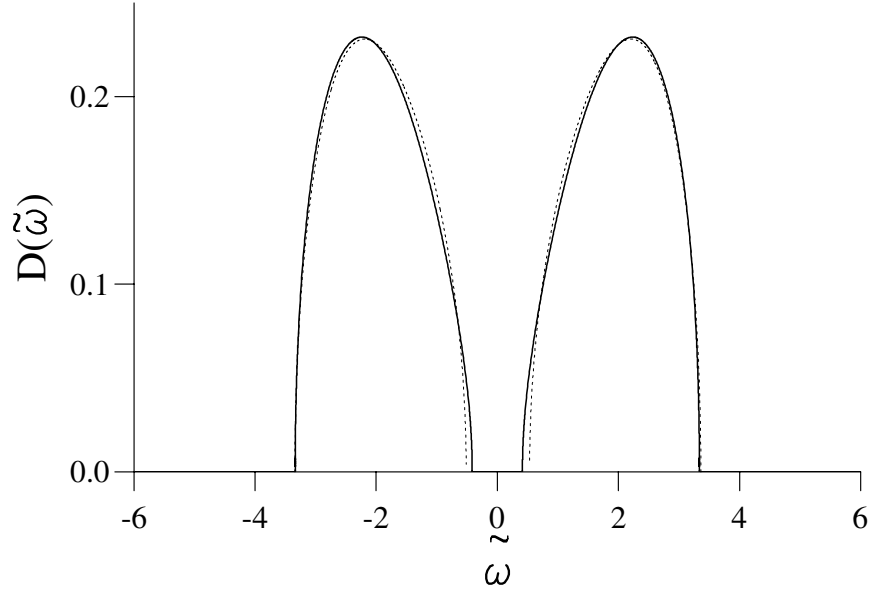


Abbildung 6.3: Zustandsdichte im Hubbard Modell für  $U = 4\sqrt{2} \approx 5.66$ . Dargestellt sind die mit Hilfe der Störungsentwicklung einschließlich zweiter Ordnung in  $1/U$  (gepunktete Linie) und dem Local Moment Zugang (durchgezogene Linie) berechneten Funktionen.

Für die Lücke ergeben sich dabei folgende Werte [27]

$$\Delta^{\text{IPT}}(U = 11.314) = 7.0803, \quad \Delta^{\text{IPT}}(U = 8.7681) = 4.4456, \quad (6.5)$$

so daß sie durch

$$\Delta_3^{\text{IPT}}(U) = U - 4 - \frac{1.99}{U} - \frac{7.29}{U^2} \quad (6.6)$$

approximiert werden kann.

Der Korrekturterm erster Ordnung in  $1/U$  stellt das Doppelte des entsprechenden Ausdrucks der Störungsentwicklung dar, während der Beitrag zweiter Ordnung denjenigen des Local Moment Zugangs übersteigt. Die kritische Wechselwirkung beträgt  $U_c^{\text{IPT}} = 5.196 = 1.3W$  und liegt damit über den mit dem Local Moment Zugang und der Störungsentwicklung berechneten Werten. Die mit der Iterierten

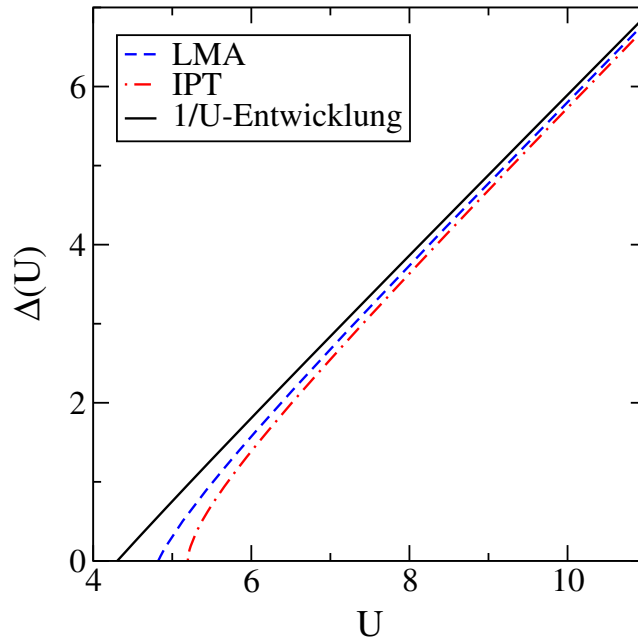


Abbildung 6.4: Mit der Iterierten Störungstheorie, dem LMA und der Störungsentwicklung ermittelte Mott-Hubbard Lücke. Strichgepunktete Kurve: Iterierte Störungstheorie. Gestrichelte Kurve: Local Moment Zugang. Durchgezogene Kurve:  $1/U$ -Entwicklung einschließlich dritter Ordnung in  $1/U$ .

Störungstheorie ermittelte Lücke ist zusammen mit den Daten der Störungsentwicklung in Abbildung 6.4 dargestellt.

Abbildung 6.5 zeigt die mit Hilfe beider Verfahren erhaltene Zustandsdichte bei  $U = 6.75 = 1.68W$ . Die Iterierte Störungstheorie liefert das richtige qualitative Verhalten der Zustandsdichte. Quantitativ besteht sowohl für die Lücke als auch für die Frequenzabhängigkeit der Zustandsdichte eine stärkere Abweichung vom korrekten Resultat als beim LMA.

Der Real- und der Imaginärteil der Einteilchen-Selbstenergie für  $U = 6$  sind

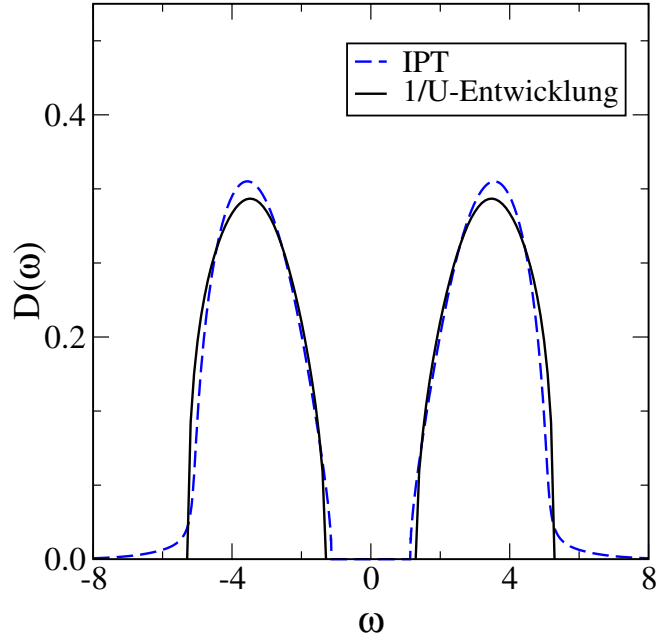


Abbildung 6.5: Zustandsdichte im Mott-Hubbard Modell für  $U = 6.75$ . Die gestrichelte Linie repräsentiert die mit Hilfe der Iterierten Störungstheorie (IPT) erhaltenen Daten, die durchgezogene Linie gibt das Ergebnis der Störungsentwicklung einschließlich zweiter Ordnung in  $1/U$  für die formverändernden Anteile und dritter Ordnung in  $1/U$  für die Energielücke wieder.

mit den Ergebnissen der Störungsentwicklung einschließlich dritter Ordnung in  $1/U$  jeweils in den Abbildungen 6.6 und 6.7 aufgetragen. Die qualitative Übereinstimmung der Kurven ist recht gut. Den Hauptgrund für Abweichungen stellt die unterschätzte Größe der Lücke dar.

Der Local Moment Zugang liefert eine deutlich bessere Beschreibung des Mott-Hubbard Isolators für  $U > 1.4W$ . Der Bereich  $1.08W \leq U_c < 1.3W$  kann jedoch weder durch die Ergebnisse des LMA noch durch die Ergebnisse der IPT zuverlässig

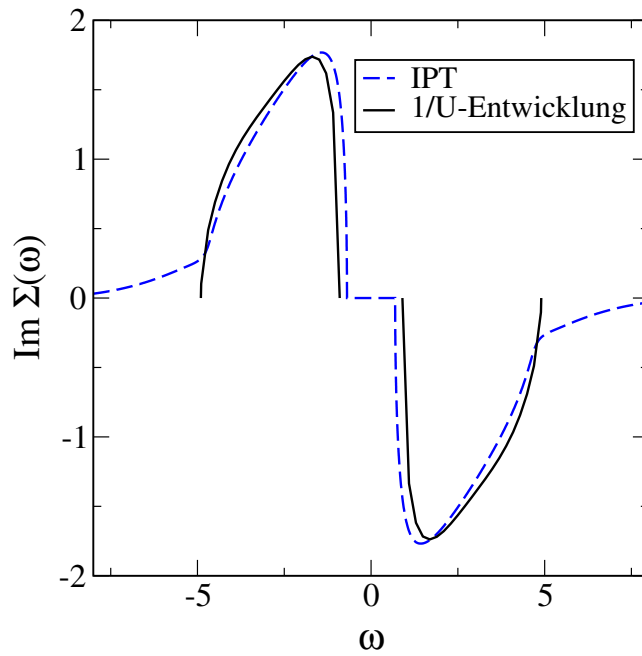


Abbildung 6.6: Mit der Iterierten Störungstheorie und der  $1/U$ -Entwicklung berechneter Imaginärteil der Einteilchen-Selbstenergie für  $U = 1.5W$ . Gestrichelte Kurve: Iterierte Störungstheorie. Durchgezogene Kurve:  $1/U$ -Entwicklung einschließlich dritter (Ordnung in  $1/U$ ).

repräsentiert werden.

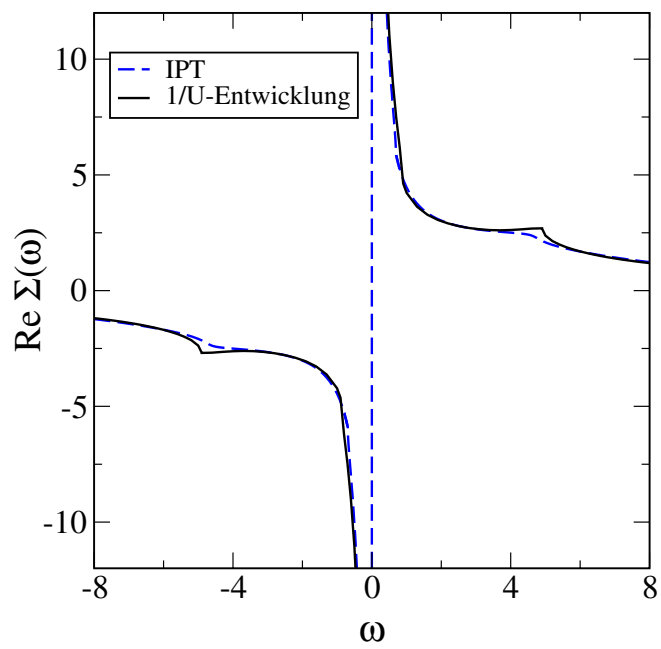


Abbildung 6.7: Mit der Iterierten Störungstheorie und der Störungsentwicklung berechneter Realteil der Einteilchen-Selbstenergie für  $U = 1.5W$ . Gestrichelte Kurve: Iterierte Störungstheorie. Durchgezogene Kurve:  $1/U$ -Entwicklung einschließlich dritter Ordnung in  $1/U$ .

## 7 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde eine Störungsentwicklung in  $1/U$  der Einteilchen-Greenfunktion des Mott-Hubbard Isolators am Bethegitter unendlicher Koordinationszahl abgeleitet und durchgeführt. Aus der Kato-Takahashi Störungstheorie resultierende Ausdrücke der Ordnung  $1/U^n$  konnten sowohl für die formverändernden Anteile als auch für die zur Renormierung der Lücke führenden Terme durch Polynome in  $\hat{h}_0$  ersetzt werden. Diese enthielten für gerades (ungerades)  $n$  ausschließlich gerade (ungerade) Potenzen von  $\hat{h}_0$ . Für  $U \gg U_c$  ist die Zustandsdichte daher durch Angabe weniger Zahlen beschrieben. Dadurch wird die Verbesserung der Ergebnisse numerischer Verfahren, in welche bisher eine durch wenige Peaks dargestellte Zustandsdichte einging, denkbar.

Die in dieser Arbeit entwickelte Methode wurde an den exakten Ergebnissen des Falicov-Kimball Modells geprüft. Ausdrücke einschließlich zweiter Ordnung in  $1/U$  lieferten bereits eine sehr gute Beschreibung des Isolators für  $U > 3t = 1.5U_c^{\text{FK}}$ . Die extrapolierte Lücke in dritter Ordnung besaß eine Abweichung von nur 8 Prozent vom exakten Wert. In Erwartung einer ebenso guten Beschreibung des Hubbard Modells konnte die kritische Wechselwirkung nach Betrachtung der fünften Ordnung in  $1/U$  zu  $U_c = (1.08 \pm 0.01)W$  abgeschätzt werden.

Als erste Anwendung wurden drei in führender Ordnung in  $1/U$  exakte Näherungsverfahren für den Mott-Hubbard Isolator geprüft. Die innerhalb der Hubbard-III Näherung berechnete Korrektur erster Ordnung zur Lücke weist, wie im Falicov-Kimball Modell auch, im Gegensatz zur Störungstheorie ein positives Vorzeichen auf. Eine gute Übereinstimmung der Einteilchen-Zustandsdichte mit dem Resultat der  $1/U$ -Entwicklung ist nicht vorhanden und die kritische Wechselwirkung am Mott-Hubbard Übergang ist mit  $U_c^{\text{H-III}} = 0.866W$  zu klein.

Die aus dem Local Moment Zugang folgende Zustandsdichte stimmt mit der Störungsentwicklung für  $U \geq 1.4W$  ausgezeichnet überein. Die Korrektur erster Ordnung zur Energielücke weicht nur gering vom exakten Wert ab. Eine Korrektur zweiter Ordnung ist in der Störungsentwicklung, im Gegensatz zum Local Moment Zugang, jedoch nicht vorhanden. Daher überschätzt der Local Moment Zugang die kritische Wechselwirkung mit  $U_c^{\text{LMA}} \approx 1.21W$ .

Die Iterierte Störungstheorie liefert eine qualitativ schwächere Beschreibung des Isolators als der Local Moment Zugang. So besitzen die Zustandsdichte und der Imaginärteil der Einteilchen-Selbstenergie nach oben (unten) zu stark ausgedehnte obere (untere) Hubbardbänder. Die Iterierte Störungstheorie enthält eine größere Korrektur zweiter Ordnung zur Lücke als der Local Moment Zugang. Daher ist die kritische Wechselwirkung  $U_c^{\text{IPT}} \approx 1.3W$  größer und weicht stärker vom Ergebnis der Störungsentwicklung ab.

Als weitere Anwendung folgt der Vergleich mit den Resultaten numerischer Verfahren, wie der Exakten Diagonalisierung [10], der Numerischen Renormierungsgruppe und der Random Dispersion Näherung (RDA) [10, 13]. Diese Untersuchungen dauern derzeit noch an.



# Literaturverzeichnis

- [1] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London Ser. A **276**, 238 (1963); *ibid.* **277**, 237 (1963).
- [2] M.C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. **10**, 159 (1963).
- [3] J. Kanamori, Prog. Theor. Phys. **30**, 275 (1963).
- [4] M. Cyrot, Physica B **91**, 141 (1977).
- [5] W. Langer, M. Plischke und D. Mattis, Phys. Rev. Lett. **23**, 1448 (1969).
- [6] P. W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987).
- [7] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London Ser. A **281**, 401 (1964).
- [8] N.F. Mott, *Metal-Insulator Transitions*, 2nd edition, Taylor and Francis, London (1990).
- [9] W.F. Brinkman und T.M. Rice, Phys. Rev. B **2**, 4302 (1970).
- [10] F. Gebhard, *The Mott Metal-Insulator Transition*, Springer, Berlin (1997).
- [11] F. Gebhard und A.E. Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. **68**, 244 (1992);  
P.-A. Bares und F. Gebhard, Europhys. Lett. **29**, 573 (1995).
- [12] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth und M.J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
- [13] R.M. Noack und F. Gebhard, Phys. Rev. Lett. **82**, 1915 (1999).

- 
- [14] J. Schlipf, M. Jarrell, P.G.J. van Dongen, N. Blümer, S. Kehrein, Th. Pruschke und D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **82**, 4890 (1999).
  - [15] M.J. Rozenberg, R. Chitra und G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **83**, 3498 (1999).
  - [16] W. Krauth, Phys. Rev. B **62**, 6860 (2000).
  - [17] R. Bulla, Phys. Rev. Lett. **83**, 136 (1999).
  - [18] R. Bulla und M. Potthoff, Eur. Phys. J. B **13**, 257 (2000); Y. Ono, R. Bulla, A.C. Hewson und M. Potthoff (unveröffentlicht, arXiv cond-mat/0103315).
  - [19] R. Bulla, T.A. Costi und D. Vollhardt, Phys. Rev. B **64**, 045103 (2001).
  - [20] M. Caffarel und W. Krauth, Phys. Rev. Lett. **72**, 1545 (1994).
  - [21] E.N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, Springer, Berlin (1979).
  - [22] A.L. Fetter und J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw-Hill, New York (1971).
  - [23] T. Kato, Prog. Theor. Phys. **4**, 154 (1949).
  - [24] M. Takahashi, J. Phys. C **10**, 1289 (1977).
  - [25] P.G.J. van Dongen, Phys. Rev. B **45**, 2267 (1992).
  - [26] D.E. Logan, M.P. Eastwood und M.A. Tusch, Phys. Rev. Lett. **76**, 4785 (1996).
  - [27] M.P. Eastwood, Dissertation (Universität Oxford, GB, 1998; unveröffentlicht).
  - [28] E. Kalinowski und F. Gebhard, J. Low Temp. Phys. **126**, 979 (2002).

# Danksagung

An erster Stelle möchte ich Herrn Prof. Dr. Florian Gebhard, dem Betreuer dieser Arbeit, ein großes und herzliches Dankeschön aussprechen. Seine konstruktive Anleitung und fachliche Beratung sind mir sehr hilfreich gewesen. Für die Aufmerksamkeit, die er der Problemstellung meiner Arbeit gewidmet hat, bin ich ihm sehr dankbar.

Herrn Prof. Dr. Bruno Eckhardt danke ich für die Begutachtung der Arbeit.

Für die freundliche Atmosphäre im Institut und die erwiesene Hilfsbereitschaft danke ich allen Mitgliedern der Arbeitsgruppe Vielteilchentheorie sowie Herrn Dr. Steffen Kuckenburg. Insbesondere hat Herr Martin Paech die optische Erscheinung der Arbeit optimiert.

Dem Graduiertenkolleg "Optoelektronik mesoskopischer Halbleiter" danke ich für die finanzielle Unterstützung. In seinem Rahmen hatte ich Gelegenheit, an vielen interessanten Veranstaltungen teilzunehmen.

Schließlich bin ich meiner Mutter und meinem Vater für deren Ermutigung und Unterstützung in jeglicher Hinsicht sehr dankbar.

